

2018

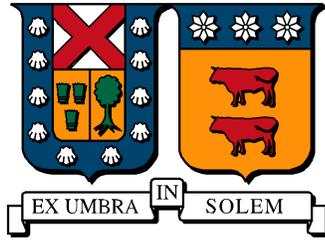
DESARROLLO DE UN CÓDIGO PARA LA MODELACIÓN DE SUSPENSIONES SÓLIDAS USANDO EL MÉTODO DE LA FRONTERA INMERSA

PEREZ FUENTES, AGUSTIN IGNACIO

<http://hdl.handle.net/11673/24332>

Repositorio Digital USM, UNIVERSIDAD TECNICA FEDERICO SANTA MARIA

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA
VALPARAÍSO – CHILE



DESARROLLO DE UN CÓDIGO PARA LA
MODELACIÓN DE SUSPENSIONES SÓLIDAS
USANDO EL MÉTODO DE LA FRONTERA INMERSA

AGUSTÍN IGNACIO PÉREZ FUENTES

TESIS DE GRADO PARA OPTAR AL GRADO DE:
MAGISTER EN CIENCIAS DE INGENIERÍA MECÁNICA
Y AL TÍTULO DE :
INGENIERO CIVIL MECÁNICO

PROFESOR GUÍA: Ph. D. Romain Gers
PROFESOR CORREFERENTE: Ph. D. Olivier Skurtys

Enero - 2018

TÍTULO DE LA TESIS:

**DESARROLLO DE UN CÓDIGO PARA LA MODELACIÓN
DE SUSPENSIONES SÓLIDAS USANDO EL MÉTODO DE
LA FRONTERA INMERSA.**

AUTOR:

AGUSTÍN IGNACIO PÉREZ FUENTES

TRABAJO DE TESIS, presentado en cumplimiento parcial de los requisitos para el grado de Magíster en Ciencias de la Ingeniería Mecánica de la Universidad Técnica Federico Santa María.

Ph. D. Romain Gers _____

Ph. D. Olivier Skurtys _____

Ph. D. Marcela Cruchaga _____

Valparaíso, Chile, Enero de 2018.

Agradecimientos

Rompo con la escritura científica en tercera persona para dedicar unas palabras de corazón a todos quienes me han acompañado en estos nueve años que parten con mi ingreso a la universidad y se cierran con la entrega de este documento.

A Gastón y Clara –mis padres– quienes me han acompañado y brindado su apoyo incondicional en cada uno de mis pasos y a quienes llevo grabados profundamente en mi corazón. A mis hermanas Natalia y Clara y a mi hermano Gastón, quienes también están constantemente presentes en mi vida –independiente de la distancia física–, a sus parejas y a sus bellos hijos e hijas: Macarena, Antonia, Lucas y Mateo. A Yaque y Cecilia que me acompañan desde mi infancia.

A mis queridos amigos, si quiero cerrar esta sección en una sola página no me puedo detener en ninguno de ustedes en particular. A todos quienes han sido parte de mi proceso formativo, ya sea como profesor escolar, universitario o en algún otro contexto ajeno a los anteriores.

A todos ustedes y a quienes haya omitido u olvidado mencionar, les doy mis agradecimientos más sinceros pues no podría haber culminado esta ardua tarea solo. Su compañía y comprensión, a veces un cotidiano intercambio de palabras, una mirada bañada de ternura o una risa compartida me han dado el ánimo suficiente para terminar esta tarea que tantas veces he querido abandonar. Las palabras no bastan para hacerles saber cuan valiosos son para mí pero tendrán que hacerlo por el momento.

Agradezco la DGIIP por la asignación de becas de arancel y mantención y a Conicyt por el financiamiento mediante la beca **CONICYT/PCHA/Magíster Nacional/2015-22150720**.

Resumen

Se realiza una investigación respecto a los métodos numéricos que se aplican actualmente para el estudio de flujos particulados con un enfoque dirigido hacia la presencia de grandes cantidades de sólidos en suspensión. Dentro de las metodologías encontradas, se opta aquella propuesta por Uhlmann (2005) que consiste en una formulación de las ecuaciones de Navier-Stokes con un término adicional que contiene los efectos de los cuerpos sumergidos. Esta tipo de representación de la interfaz es denominada «método de la frontera inmersa».

Se desarrolla de un código bidimensional dentro del cual se implementa tanto el método original de Uhlmann como modificaciones propuestas en la literatura cuyo objetivo es mejorar la representación del sólido dentro del fluido y modelar las interacciones entre sólidos. El código es sometido a una serie de validaciones que evidencian falencias y aciertos dentro del programa. Destacan una sobrestimación del arrastre y la sustentación cuyas causas aún no logran ser determinadas y un ocasional enlazamiento entre sólidos que colisionan que evita la representación de ciertos fenómenos físicos de interés.

Se expone la discretización para una versión tridimensional del código y una maqueta de éste, a partir de la cual se presentan resultados preliminares que si bien no son capaces de representar la física del problema, muestran un avance concreto en pos del desarrollo de una herramienta capaz de representar suspensiones densas más cercanas a la realidad.

Palabras clave: Suspensiones sólidas, flujos bifásicos, método de la frontera inmersa, modelo de esferas suaves.

Abstract

A research is made regarding numerical methods available to study particulate flows, focusing on dense solid-liquid suspensions. From within the found approaches the method from Uhlmann (2005) is selected which consists in a modified Navier-Stokes equation that contains an extra term that represents the effects of a solid boundary over the fluid. Such an approach is called the «immersed boundary method».

A two-dimensional code has been developed where both the original formulation and some variations suggested in the literature are implemented, whose objective is to improve the representation of the particle's boundary and to model the solid-solid interactions. Validation cases are run in order to show the program's shortcomings and strenghts. Both the drag and the lift are overestimated when the particle is moving and its causes are yet to be found. Also it's been found that occasionally the solids get stuck together as they collide instead of bouncing off which avoids certain physical phenomena from appearing.

The discretization procedure for the tridimensional version of the code is shown and an outline for the code is developed, from it, preliminar results are obtained that, even though they fail to reproduce the expected physics of the problem, show a concrete advance towards the development of a tool capable of representing the solid suspensions in conditions closer to reality.

Keywords: Solid suspensions, two-phase flows, immersed boundary method, soft-sphere model.

Índice general

1. Introducción	1
2. Fundamentos de dinámica de fluidos	3
2.1. Principios de conservación fundamentales	3
2.1.1. Hipótesis de un medio continuo	3
2.1.2. Conservación de la masa	4
2.1.3. Conservación del momentum	4
2.2. Números adimensionales	6
2.2.1. Número de Reynolds	6
2.2.2. Número de Strouhal	7
2.2.3. Número de Stokes	8
3. Presencia de sólidos en una suspensión	11
3.1. Clasificación de las suspensiones	11
3.2. Procesos de colisión	12
3.3. Contacto entre partículas	14
3.3.1. Colisiones secas	15
3.3.2. Colisiones en un medio viscoso	20
4. Modelación de los fenómenos	23
4.1. Introducción	23
4.2. Modelación de flujos particulados	24
4.3. Método IB de Uhlmann	28
5. Código bidimensional	35
5.1. Dominio euleriano	35
5.2. Dominio lagrangiano	37
5.3. Discretización de las ecuaciones	38
5.3.1. Estimación del campo de fluidos preliminar: « <i>step a</i> »	38

5.3.2.	Determinación del campo de forzado euleriano: « <i>step b</i> » al « <i>step d</i> ».	43
5.3.3.	Imposición de la condición de no-deslizamiento: « <i>step e</i> ».	44
5.3.4.	Pasos de corrección por presión: « <i>step f</i> » al « <i>step h</i> ».	47
5.3.5.	Integración temporal del movimiento de la partícula y modelo de colisiones.	49
5.4.	Casos de validación.	54
5.4.1.	Flujo de Poiseuille	54
5.4.2.	Vórtices de Taylor-Green	56
5.4.3.	Cilindro estacionario	58
5.4.4.	Cilindro oscilante	65
5.4.5.	Sedimentación de una única partícula	66
5.5.	Aplicaciones	67
5.5.1.	Sedimentación de un par de partículas	67
5.5.2.	Partículas arrastradas en un canal finito	70
6.	Conclusiones	77
A.		81
A.1.		81
B.		85
B.1.		85
B.2.		87
B.3.		90
B.3.1.		91
B.3.2.		91
B.4.		96
B.5.		101
B.6.		104
B.7.		105
B.7.1.		106
C.		121
C.1.		121
C.2.		122
C.3.		124
C.3.1.		124
C.3.2.		129

C.3.3.	130
C.3.4.	131
C.3.5.	132

Capítulo 1

Introducción

Cuando el contraste y la iluminación un recinto lo permiten, se hace posible observar a delgadas fibras y pequeñas motas de polvo que se desplazan delicadamente siguiendo los vaivenes del aire. Éste, pareciera moverse independientemente de aquéllas y así se dice que las primeras actúan como trazadores –es decir– que permiten hacerse una idea de los complejos movimientos que realiza el fluido en cada instante de tiempo.

Pero no siempre se da que los efectos de los cuerpos inmersos sean despreciables y para referirse a ello basta con imaginar a una pelota de fútbol, pateada con fuerza hacia el arco en un partido cualquiera. Su movimiento perturba al aire que la rodea provocando una ráfaga de viento a su paso, como lo diría cualquier arquero haya visto pasar a alguna junto a sí. A su vez, si esta fuese pateada con el efecto (giro) adecuado, experimentaría una inusual curvatura en su movimiento apodado cotidianamente *chanfle* y atribuido al denominado *efecto de Magnus*.

De este modo, se da cuenta de que la interacción entre partículas sólidas y un fluido en el que se encuentran inmersas conforman un terreno fértil para la investigación científica y es el objetivo del presente documento adentrarse en esto, especialmente en las «*suspensiones sólidas densas*» que serán descritas más adelante. Basta con decir por ahora que son aquellas donde existe una gran concentración de partículas, de modo tal que se debe tomar en consideración no sólo la interacción sólido-fluido, sino también las interacciones sólido-sólido (colisiones).

Estudiar estos fenómenos de manera experimental exige de aparatos de medición complejos y de alto costo por lo que una alternativa atractiva consiste en la utilización de modelos numéricos que permitan, a partir de ecuaciones ya establecidas, recrear el fenómeno real en una plataforma digi-

tal.

Existen diversos modelos para hacer esto: los modelos de dos fluidos («*two fluid models*») describen al conjunto de la fase dispersa como un fluido continuo, requiriendo ciertas ecuaciones de clausura apropiadas, Acá, se calculan valores promediados de fracción volumétrica y velocidad, por ejemplo, no permitiendo el estudiar a los sólidos individualmente (van Wachem and Almstedt, 2003). Otros modelos como los de malla móvil son capaces de resolver el flujo con precisión, capturando el entorno de las partículas, pero requieren de constantes remallados que penalizan fuertemente el tiempo de cálculo total del programa (Haeri and Shrimpton, 2012).

La tarea entonces consistirá en la elección de un modelo adecuado de acuerdo a lo que quiere ser estudiado. Si la meta se ha definido como el estudio de suspensiones densas entonces se exigirá que el modelo sea capaz de resolver el movimiento de las partículas, sus colisiones y, por supuesto, al fluido mismo. Todo esto deberá ser acotado a la capacidad computacional disponible y a los software existentes o a lo que sea accesible de programar. Bajo los criterios anteriores se ha optado por una modelación que integra los métodos de volúmenes finitos, de la frontera inmersa y de volúmenes discretos para atacar al problema.

En la presente tesis ha programado un código bidimensional basado en los métodos descritos en el párrafo anterior basado en la publicación de Uhlmann (2005) y otras posteriores que se han desprendido de esta. Se presentan casos de validación semejantes aquellos utilizados en la literatura y un grupo de casos adicionales cuyo objetivo es mostrar algunas de las funcionalidades de la herramienta trabajada. Adicionalmente se ha programado una versión tridimensional del código la cual si bien no ha conseguido pasar la fase de validación, se considera valioso en cuanto las ecuaciones diferenciales ya han sido apropiadamente discretizadas y se obtienen resultados estables que pueden servir como maqueta para un desarrollo posterior.

Capítulo 2

Fundamentos de dinámica de fluidos

El presente capítulo expone los conocimientos mínimos de la mecánica de fluidos que harán falta a lo largo de la presentación de este trabajo. Se presentan las ecuaciones de conservación y de Navier-Stokes como también números adimensionales que resultarán de interés en capítulos posteriores.

2.1. Principios de conservación fundamentales

Para una exposición detallada de la derivación de las siguientes ecuaciones, se recomienda al lector acudir al texto de Batchelor (1967).

2.1.1. Hipótesis de un medio continuo

A lo largo de este documento se considerará al fluido como un *medio continuo*, es decir, que sus propiedades físicas como su densidad, viscosidad y velocidad variarán de forma continua a lo largo del espacio. Lo anterior se justifica en cuanto a que se trabajará en escalas de longitud lo suficientemente grandes como para que las fluctuaciones propias de la naturaleza discreta de la materia se vean suavizadas «en promedio».¹

¹De acuerdo a la teoría de probabilidades, asumiendo una distribución de Poisson, las fluctuaciones de las propiedades serán inferiores al 1 % para un volumen que contenga 10^5 moléculas. De acuerdo a Crowe et al. (2012) para contener 10^5 moléculas de agua bastaría un cubo de lado $1.5 \times 10^{-2}[\mu m]$.

2.1.2. Conservación de la masa

Considérese una región del espacio Ω donde habita un fluido de densidad ρ con un campo de velocidad \mathbf{u} asociado a cada punto \mathbf{x} del espacio. En condiciones no relativistas, es sabido que la masa de este fluido se debe conservar, principio que conduce a denominada *ecuación de continuidad* o de *conservación de la masa*. Matemáticamente, lo anterior puede ser expresado según:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad . \quad (2.1)$$

Un fluido se denomina *incompresible* cuando la densidad es considerada como una constante. Cuando ello ocurre, la ecuación (2.1) toma la forma:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad . \quad (2.2)$$

Un vector que posea divergencia cero, como aquél descrito por la ecuación anterior es denominado *solenoidal*. El presente documento se limita a tratar solamente con este tipo de fluidos.

2.1.3. Conservación del momentum

Las ecuaciones de Navier-Stokes provienen, en parte, de un balance de momentum sobre una región de fluido determinada, de forma análoga a la segunda ley de Newton. En notación indicial, esto resulta en la expresión:

$$\rho \frac{du_i}{dt} = -\rho \frac{\partial (u_j u_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_i, \quad (2.3)$$

donde f_i corresponde a una fuerza por unidad de volumen, denominada tradicionalmente *fuerza de cuerpo* y σ_{ij} son las componentes del tensor de esfuerzo, que es una manifestación de las reacciones internas en el fluido y es afectado por el movimiento del mismo. Se considera a σ_{ij} como la suma de una componente isotrópica $\bar{p}\delta_{ij}$ y una restante deviatórica d_{ij} , de modo que:

$$\sigma_{ij} = -\bar{p}\delta_{ij} + d_{ij}. \quad (2.4)$$

El último término, d_{ij} es de complejo desarrollo y se refiere al lector a Batchelor (1967) para conocer detalles sobre su derivación. Su expresión analítica para un fluido newtoniano consiste en:

$$d_{ij} = \mu \left(\left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), \quad (2.5)$$

donde los términos entre corchetes del lado derecho de la ecuación son conocidos en conjunto como el tensor razón de deformación mientras que el restante es la divergencia del campo de velocidades, ponderada por el delta de Kronecker. En general, se denominará como *newtonianos* a aquellos fluidos que satisfagan la ecuación (2.5).

Reemplazando (2.5) sobre (2.4) se obtiene la expresión para el tensor de esfuerzos:

$$\sigma_{ij} = -\bar{p}\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \delta_{ij} \right). \quad (2.6)$$

Sustituyendo la ecuación (2.6) en (2.3) y dividiendo por ρ , se obtiene:

$$\frac{du_i}{dt} = -\frac{\partial(u_j u_i)}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j \partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j^2} \delta_{ij} \right) + f_i. \quad (2.7)$$

Donde $\nu = \mu/\rho$ es denominada la *viscosidad cinemática* del fluido y $p = \bar{p}/\rho$ es una presión renormalizada. La fórmula anterior en conjunto con la ecuación (2.1) son conocidas como las *ecuaciones de Navier-Stokes*, que rigen el movimiento de un fluido a lo largo del tiempo. Al invocar la condición de incompresibilidad, *i.e.* ec. (2.2), (2.7) se simplifica en la forma:

$$\frac{du_i}{dt} = -\frac{\partial(u_j u_i)}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} + f_i, \quad (2.8)$$

que en notación vectorial se expresa como:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}. \quad (2.9)$$

La ecuación (2.8) puede ser llevada a términos adimensionales definiendo variables análogas definidas como:

$$x_i = L_r \hat{x}_i, \quad (2.10a)$$

$$t = t_r \hat{t}, \quad (2.10b)$$

$$u_i = u_r \hat{u}_i, \quad (2.10c)$$

$$p = p_r \hat{p}, \quad (2.10d)$$

$$f_i = f_r \hat{f}_i, \quad (2.10e)$$

donde el subíndice r denota a las magnitudes de referencia y no debe ser entendida como parte de la notación indicial. Las variables adimensionales como el tiempo \hat{t} se diferencian de sus contrapartes por el acento matemático que llevan en su escritura.

Resultan de especial interés los parámetros L_r y u_r pues a partir de ellos puede construirse el resto del set de parámetros referenciales. En efecto, $t_r = L_r/u_r$, $p_r = u_r^2$ y $f_r = u_r^2/L_r$. Así, es posible reescribir la ecuación (2.8) en la forma:

$$\frac{d\hat{u}_i}{d\hat{t}} = -\frac{\partial(\hat{u}_j \hat{u}_i)}{\partial \hat{x}_j} - \frac{\partial \hat{p}}{\partial \hat{x}_i} + \left(\frac{\nu}{L_r u_r} \right) \frac{\partial^2 \hat{u}_i}{\partial \hat{x}_i^2} + \hat{f}_i, \quad (2.11)$$

reescribible como:

$$\frac{d\hat{u}_i}{d\hat{t}} = -\frac{\partial(\hat{u}_j \hat{u}_i)}{\partial \hat{x}_j} - \frac{\partial \hat{p}}{\partial \hat{x}_i} + \left(\frac{1}{Re} \right) \frac{\partial^2 \hat{u}_i}{\partial \hat{x}_i^2} + \hat{f}_i. \quad (2.12)$$

La constante Re que ha aparecido en la ecuación (2.12) es un número adimensional de fundamental importancia en la mecánica de fluidos que será definido a continuación y se denomina «*número de Reynolds*».

2.2. Números adimensionales

Se presentan en esta sección números adimensionales que serán especialmente relevantes a lo largo de este trabajo.

2.2.1. Número de Reynolds

Aparece de forma natural al adimensionalizar la ecuación de Navier-Stokes como se puede apreciar en la ecuación (2.12). Relaciona las fuerzas viscosas del fluido con algún parámetro de inercia acorde al fenómeno que se desea estudiar. Su formulación elemental consiste en la siguiente:

$$Re = \frac{Lu}{\nu}, \quad (2.13)$$

para la longitud y velocidad características L y u , respectivamente que serán elegidas según la física del problema y para la viscosidad cinemática ν del fluido.

Sus aplicaciones son extensas, por ejemplo, en su forma elemental puede utilizarse para prever el régimen de flujo al interior una tubería (*laminar* o *turbulento*) considerando como longitud característica al diámetro D de la tubería y a \bar{u} como el valor medio de la velocidad en una sección transversal del flujo. Permite también caracterizar el flujo alrededor de un cuerpo sumergido como podría ser una partícula sólida o alguna estructura como un pilar.

En el caso de una partícula esférica de diámetro D , se define al número de Reynolds para partículas Re_p como:

$$Re_p = \frac{D\|\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_f\|}{\nu}, \quad (2.14)$$

donde \mathbf{u}_c es la velocidad del centro de masa del cuerpo en estudio y \mathbf{u}_f es una velocidad representativa del fluido alrededor de éste. Cabe destacar que esto es aplicable también para otros cuerpos no-esféricos donde la longitud característica debe ser elegida apropiadamente según sea la geometría del sólido.

El Re_p es interesante en cuanto permite caracterizar el flujo alrededor de un cuerpo sumergido, como en el caso de la «*calle de vórtices de Von Kármán*» que consiste en un desprendimiento regular de vórtices como puede ser visualizado en la figura (2.1). En el caso de un “cilindro infinito” o una partícula circular bidimensional, éste fenómeno se observa a partir de un $Re_p \approx 50$.

2.2.2. Número de Strouhal

En el fenómeno expuesto en la figura (2.1), el desprendimiento de vórtices se da de manera regular dependiendo del Re_p y de la geometría de la partícula que desprende los vórtices. Intuitivamente surge la pregunta: ¿es cuantificable también mediante algún otro número adimensional? Considerando que los vórtices se desprenden con una frecuencia f , entonces es posible construir un nuevo número adimensional, apodado como el «*número de Strouhal*», Sl :

$$Sl = \frac{fD}{u_\infty}, \quad (2.15)$$

donde u_∞ es la velocidad «de corriente libre» que existe aguas arriba del cuerpo que desprende los vórtices. Park et al. (1998) estudiaron numéricamente este fenómeno y determinaron una correlación que permite asociar Re_p y Sl para Reynolds hasta 160 en el flujo alrededor de cilindros infinitos.

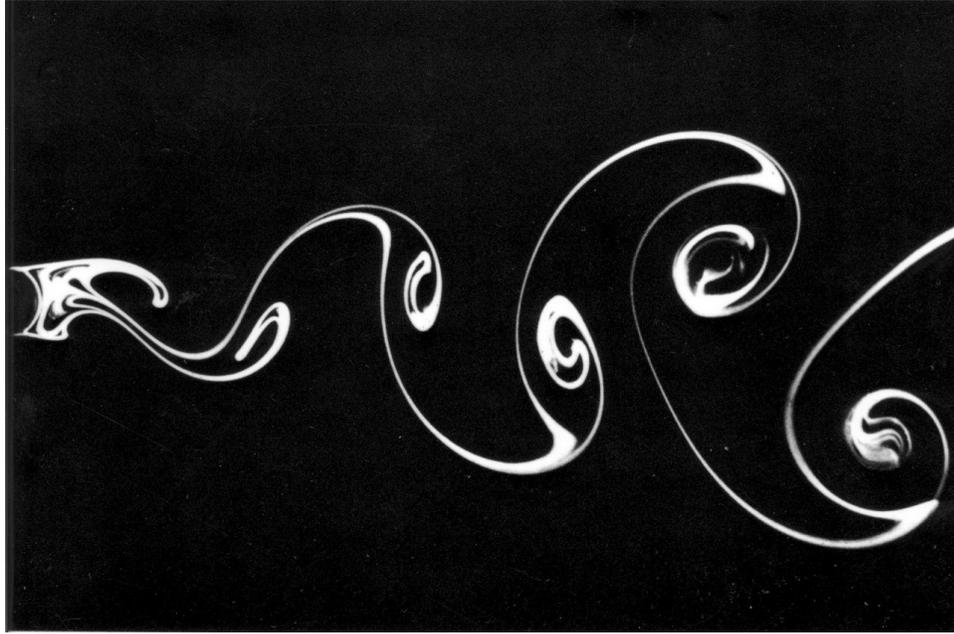


Figura 2.1: Calle de vórtices de Von Kármán detrás de un cilindro circular a un $Re_p = 140$. Agua que fluye a 1.4cm/s alrededor de un cilindro de diámetro 1cm . Las líneas blancas pueden ser vistas a partir de la precipitación electrolítica de un humo blanco coloidal que está siendo iluminada. Fotografía por Sadatoshi Taneda y recogido del libro “An Album of Fluid Motion” por Milton Van Dyke (1982).

$$Sl(Re) = \frac{-3.3265}{Re} + 0.1816 + 1.6 \times 10^{-4} Re, \quad (2.16)$$

la cual es de suma utilidad para verificar la física en códigos computacionales donde la «interacción entre fluidos y estructura» es relevante y será utilizada en capítulos posteriores.

2.2.3. Número de Stokes

El número de Reynolds resulta útil para estudiar el flujo alrededor de un cuerpo estacionario, pero cuando este se desplaza resulta insuficiente. Esto es fácil de intuir cuando se piensa en el movimiento de un globo y de una piedra de dimensiones similares, ambos reaccionarán de forma muy diferente ante una corriente de aire de velocidad u_∞ , teniendo ambos el mismo Re_p . El «número de Stokes» St permite abordar este problema.

Siguiendo la definición de Crowe et al. (2012), este número puede considerarse como la razón entre un tiempo de respuesta característico de una partícula τ_p y otro tiempo característico asociado al fluido τ_f . De este modo,

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_f}. \quad (2.17)$$

Si $St \ll 1$ entonces $\tau_p \ll \tau_f$, lo que implica que la partícula tendrá amplio margen para reaccionar ante los cambios que se den en el fluido. En este sentido, la partícula actuaría como un trazador de lo que está ocurriendo en el campo de flujo.

Por otra parte, si $St \gg 1$ entonces $\tau_p \gg \tau_f$, lo que en efecto significa que la partícula no será capaz de reaccionar ante las variaciones que ocurran en el campo de velocidades y se desplazará a lo largo de este sin ser mayormente afectada.

Para efectos prácticos, se utilizará la siguiente formulación de St :

$$St = \frac{1}{9} \left(\frac{\rho_p}{\rho_f} \right) \left(\frac{Lu}{\nu} \right), \quad (2.18)$$

donde es evidente que puede considerarse a St como una extensión del número de Reynolds Re_p , corregida por la razón de densidades entre los medios que interactúan.

$$St = \frac{1}{9} \left(\frac{\rho_p}{\rho_f} \right) Re_p. \quad (2.19)$$

Davis et al. (1986) estudió la deformación de una esfera elástica de una partícula esférica elástica sumergida en un fluido viscoso y determinó que el número de Stokes es el parámetro fundamental para estimar si existiría un rebote posterior a una colisión entre ambos cuerpos.

Legendre et al. (2006) han determinado que los «coeficientes de restitución» que resultan de una colisión binaria entre partículas esféricas colapsan en una curva cuya variable independiente es el St (expresado en una formulación alternativa pero análoga), permitiendo así la proposición de un modelo generalizado para el rebote de las partículas en función de este parámetro y para el tiempo de contacto entre ambos cuerpos.

Lo anterior pretende dar cuenta de la importancia de la consideración de este número adimensional en el estudio de las suspensiones densas.

Capítulo 3

Efectos de la presencia de sólidos en una suspensión

Se estudiarán a continuación los efectos introducidos por la presencia de algún medio granular que estará inmerso en un fluido newtoniano.

3.1. Clasificación de las suspensiones

En adelante se referirá como «concentración sólida» α_s a la fracción volumétrica que ocupa la fase sólida dentro de un volumen de muestreo representativo ΔV_o de la suspensión en estudio. Esto será expresado matemáticamente según la relación:

$$\alpha_s = \lim_{\Delta V \rightarrow \Delta V_o} \frac{\Delta V_s}{\Delta V} \quad (3.1)$$

Se sigue la clasificación propuesta por Elghobashi (1994) en función la concentración de sólidos α_s y sus efectos sobre la estructura de la turbulencia del fluido. Para muy bajas concentraciones, $\alpha_s \leq 10^{-6}$, los sólidos tendrán un efecto despreciable sobre la turbulencia y el régimen es denominado «*acoplamiento en una vía*» (*one-way coupling*). Acá las partículas son sencillamente acarreadas por el fluido y se comportan como perfectos trazadores de éste.

Un segundo régimen es el denominado «*acoplamiento en dos vías*» (*two-way coupling*) que se da para $10^{-6} < \alpha_s \leq 10^{-3}$. En este caso, los efectos producidos por las partículas son suficientes como para perturbar la estructura de la turbulencia, ya sea incrementando la producción o la disipación de energía turbulenta según el número de Stokes del caso.

Finalmente, cuando $\alpha_s > 10^{-3}$ se denomina al régimen «*acoplamiento en cuatro vías*» (o *four-way coupling*). Acá la presencia de partículas es tal que comienzan a interactuar entre ellas, hidrodinámicamente y debido a colisiones directas. El caso límite donde $\alpha_s \rightarrow 1$ corresponde a los flujos granulares, que se encuentran fuera del alcance del presente trabajo.

3.2. Procesos de colisión

Una colisión consiste en una brevísima interacción entre dos cuerpos sólidos y que involucra grandes aceleraciones y cambios de velocidad, posición y orientación.

Se describirán los estudios asociados al choque entre dos esferas por ser el caso canónico a partir del cual se describen geometrías más complejas. Se descompondrá el movimiento en una componente normal y una tangencial, siguiendo la convención estándar de la literatura. El caso particular de una colisión contra un plano podrá ser considerado haciendo tender el radio de una de las esferas a infinito y, por lo tanto, no se analizará de manera particular.

Siguiendo el planteamiento de Joseph et al. (2001), el proceso de colisión completo puede ser dividido en las siguientes tres fases:

- (a) *Aproximación*: Ocurre cuando las partículas se acercan entre sí en camino a la colisión. De acuerdo a la teoría elastohidrodinámica de Davis et al. (1986), el espacio que separa las partículas se reduce rápidamente forzando al fluido intersticial a desplazarse de manera violenta, provocando pérdidas de energía mecánica debido a los efectos viscosos y resultando también en un incremento local de la presión, deformando la geometría de los cuerpos y provocando una fuerza neta que retrasa el movimiento.
- (b) *Contacto directo*: Si es que las partículas no se detuvieron en la fase de aproximación, eventualmente la distancia entre éstas será nula y parte de la energía cinética de las partículas será transformada en energía elástica y deformación plástica. La duración de una colisión (según la teoría de Hertz) suele ser mucho menor al tiempo de respuesta del fluido lo que permitirá admitir una serie de simplificaciones en la modelación de esta etapa (*cf.* Kempe and Fröhlich (2012a)).
- (c) *Rebote*: Posterior a un contacto directo, es posible que el par de partículas aún retenga la energía suficiente como para separarse y continuar

su movimiento. Las partículas experimentarán una fuerza desaceleradora producto de un descenso en la presión en la región donde el fluido ingresa «a llenar el espacio» entre las partículas que ahora se alejan entre sí.

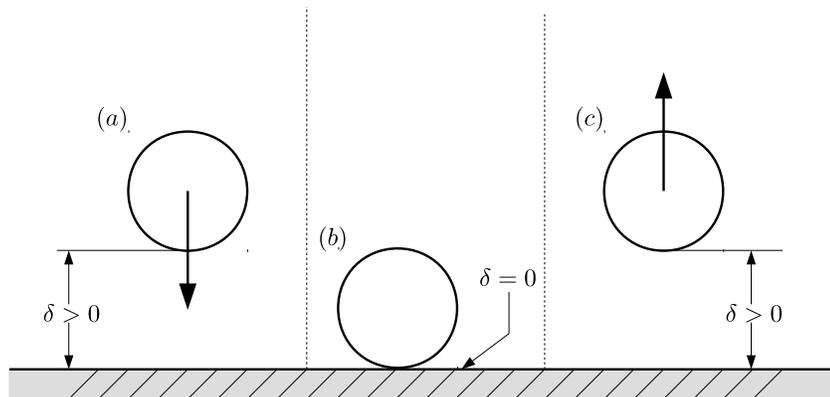


Figura 3.1: Etapas experimentadas en una colisión entre dos cuerpos. La superficie plana de color gris puede ser considerada como una partícula cuyo esfera tiende a infinito. Las etapas corresponden a: (a) Aproximación (b) Contacto directo y (c) Rebote.

Los efectos netos de las fases (a) y (c) suelen ser reunidos en la llamada «fuerza de lubricación» que suele ser convocada para suplir la inhabilidad para la correcta resolución de la fase de fluido cuando se utilizan mallas gruesas, por lo anterior será detallada posteriormente.

Estudios como los de Brenner (1961) y Davis et al. (1986) predicen que los cuerpos no serían capaces de alcanzar el contacto directo, que el rebote resultaría de la energía elástica almacenada producto de la deformación originada por efectos de la presión del fluido y no debido al contacto real de una partícula sobre la otra. Cabe destacar que estudios como estos asumen partículas esféricas completamente lisas sin agregar la variante de la rugosidad de la superficie y que éstas teorías dejan de ser válidas cuando las escalas de longitud tienden a cero en cuanto estas se basan en la teoría del medio continuo.

Más allá de lo anterior, las investigación de Davis et al. (1986) sugiere que el resultado de una colisión, cuantificado mediante el «coeficiente de

restitución» $e = v_{out}/v_{in}$ –razón entre la velocidad anterior y la posterior al choque– sería una función del número de Stokes St , hecho validado y ahondado en las investigaciones de Gondret et al. (2002) y Joseph et al. (2001). Se ha encontrado que para una esfera, existe un número crítico de Stokes $St_c \approx 10$ por debajo del cual no existirá contacto entre los cuerpos puesto que las partículas se detendrán en la fase de aproximación debido a las fuerzas hidrodinámicas. Preveen además que cuando $St \rightarrow \infty$ los efectos del fluido intersticial serán despreciables y las colisiones podrían ser modeladas mediante métodos clásicos como el de Hertz.

3.3. Contacto entre partículas

Considérense dos partículas esféricas i y j de radio R_i y R_j respectivamente. El movimiento de la partícula i es descrito a partir de la posición de su centro de masa \mathbf{x}_i , su velocidad traslacional \mathbf{v}_i y su velocidad angular $\boldsymbol{\omega}_i$. Se define el vector normal \mathbf{n}_{ij} como aquel vector unitario que apunta desde la partícula i hacia la partícula j , esto es

$$\mathbf{n}_{ij} = \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|}. \quad (3.2)$$

La velocidad relativa entre los centros de masa, será entonces:

$$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j, \quad (3.3)$$

evidentemente, la componente normal de dicho vector será:

$$\mathbf{v}_{n,ij} = (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij})\mathbf{n}_{ij}, \quad (3.4)$$

y consecuentemente, la velocidad tangencial relativa será:

$$\mathbf{v}_{t,ij} = \mathbf{v}_{ij} - \mathbf{v}_{n,ij}. \quad (3.5)$$

Un valor de particular importancia corresponde a la distancia entre las superficies δ_{ij} ,

$$\delta_{ij} = (R_i + R_j) - \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|, \quad (3.6)$$

los modelos de contacto que serán tratados posteriormente dependerán de manera crucial en esta magnitud, que es capaz de cuantificar la interpenetración entre las esferas en estudio. Destaca que si $\delta_{ij} > 0$ existirá un traslape entre ambos cuerpos, $\delta_{ij} = 0$ implica un contacto tangencial y $\delta_{ij} < 0$ implica que las partículas no están en contacto.

3.3.1. Colisiones secas

Una colisión será denominada «*seca*» cuando el fluido que envuelve a los cuerpos que entran en contacto no influye de una manera distinguible sobre el resultado del choque. El interés asociado a esto reside en que permite el estudio de un choque desde un punto de vista netamente elástico.

Existen dos enfoques diferentes al momento de estudiar las colisiones entre partículas sólidas: el de esferas duras o «*hard-sphere model*» (HSM) y el de esferas suaves o «*soft-sphere model*» (SSM).

De acuerdo a Crowe et al. (2012), el primero es sencillo de utilizar pero aplicable únicamente a colisiones binarias. La relación entre las velocidades antes y después de la colisión es dada explícitamente a través del coeficiente de restitución y del coeficiente de roce por medio de ecuaciones que se originan de un balance de momentum.

Por otra parte, el segundo modela los procesos de contacto por medio de elementos mecánicos como un resorte y un amortiguador (disipador). El proceso completo de colisión es resuelto por medio de la integración temporal ecuaciones del movimiento de Newton.

El HSM se privilegia para la modelación de flujos dispersos donde la probabilidad de una colisión entre cuerpos es baja y, por lo tanto, no se esperan colisiones múltiples simultáneas que escapan del alcance de este enfoque. Sin desmedro de lo anterior, existen estudios que aplican esta metodología a flujos de muchas partículas como aquel de Campbell and Brennen (1985), quienes utilizan este método para el estudio de flujos granulares, Hoomans et al. (1996) quienes formulan una versión integrada de HSM-CFD para el estudio bidimensional de lechos fluidizados y Helland et al. (1999) quienes utilizan una estrategia de avance temporal para HSM-CFD semejante a la que caracteriza a los SSM. Más detalles al respecto del modelo de esferas duras y trabajos derivados pueden hallarse en el review de Deen et al. (2007).

Se privilegiará detallar los modelos asociados a esferas suaves debido a que continuamente son presentados en la literatura como los más apropiados para casos donde es posible de que hayan múltiples colisiones simultáneas. Aquí, la interacción es dividida en una componente normal y otra tangencial como será desarrollado en adelante.

Colisiones normales

Los estudios canónicos para el estudio de cuerpos elásticos en colisión corresponden a los de Hertz (1881). Siguiendo la exposición de Andreotti et al. (2013), la fuerza normal de contacto $\mathbf{F}_{n,ij}$ entre las partículas esféricas

i y j es:

$$\mathbf{F}_{n,ij} = \frac{4}{3} \frac{\sqrt{R_{ij}}}{E_{ij}} \delta_{ij}^{3/2} \mathbf{n}_{ij}, \quad (3.7)$$

donde R_{ij} y E_{ij} corresponden a los análogos «reducidos» del radio y módulo de Young respectivamente para el par de esferas ij . El radio equivalente está definido de la siguiente forma:

$$R_{ij} = \left(\frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \right)^{-1}, \quad (3.8)$$

mientras que el módulo de Young reducido E_{ij} es:

$$E_{ij} = \left(\frac{1 - \nu_i^2}{E_i} + \frac{1 - \nu_j^2}{E_j} \right)^{-1}, \quad (3.9)$$

donde ν_i es la razón de Poisson de la partícula i . Siguiendo la tendencia anterior, se define la masa reducida m_{ij} como:

$$m_{ij} = \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \right)^{-1}, \quad (3.10)$$

En adelante, se prescindirá del subíndice ij cuando se trate de magnitudes reducidas en pos de simplificar la notación, ocupándolos explícitamente sólo de ser necesario para evitar confusiones.

Al respecto de la ecuación (3.7) vale la pena destacar que la fuerza elástica no es lineal respecto a la deformación δ . Esto es debido a que a medida que el desplazamiento es mayor, al tratarse de esferas, el área de contacto que resiste al movimiento incrementa de manera no-lineal. Este comportamiento normalmente será omitido de muchos modelos de colisiones para simplificar la matemática e incrementar la rapidez de los cálculos.

En una colisión seca, la pérdida de energía cinética asociada a deformación plástica, propagación de vibraciones y otras causas similares son cuantificadas en el *coeficiente de restitución seco* e_s . Para su determinación, se considera la colisión normal de una partícula esférica en contra de un plano (*e. g.* una muralla) despreciando los efectos de cualquier fluido intersticial. Matemáticamente, se expresa de la siguiente forma:

$$e_s = \left| \frac{v_{out}}{v_{in}} \right|, \quad (3.11)$$

donde $v_{in} = \|\mathbf{v}_{n,ij}\|$ al inicio de la colisión y $v_{out} = \|\mathbf{v}_{n,ij}\|$ al término de ésta. Debido a que la teoría Hertziana no considera pérdida de energía

alguna, su valor teórico será $e_s = 1$. La deformación plástica, propagación de ondas y otros fenómenos similares darán partida a un alejamiento de este valor ideal, considerándose comúnmente en la literatura coeficientes de restitución para metales $e_s \cong 0.97$ (cf. Andreotti et al. (2013)).

Finalmente, el tiempo de contacto $T_{c,H}$ es otra magnitud de relevancia en la teoría Hertziana obtenida resolviendo la ecuación de movimiento de las partículas. Consiste en un tiempo característico del proceso de colisión y se expresa matemáticamente como:

$$T_{c,H} = 2.87 \left(\frac{m_{ij}^2}{R_{ij} E_{ij}^2 v_{in}} \right)^{1/5}. \quad (3.12)$$

Colisiones tangenciales

Es poco probable que una colisión sea completamente normal pues siempre habrá una componente tangencial que se originará debido a la rotación de los cuerpos o a que la colisión misma es oblicua. La descripción de estos fenómenos no es tan directa como lo es en el caso normal y es aún un tema de investigación activo. Según la revisión de Di Renzo and Di Maio (2004) no es posible derivar una relación directa de fuerza-desplazamiento para un caso tangencial general, mas en el trabajo de Mindlin and Deresiewicz (1953) se identifican una serie de reglas que constituyen los fundamentos de los modelos tangenciales. Vu-quoc and Zhang (1999) presentan una revisión reciente de la teoría de Mindlin y Deresiewicz.

El trabajo de dichos autores demuestra que, debido a la presencia de deslizamiento tangencial, la relación de fuerza-desplazamiento depende de todo el historial de carga y de la razón de cambio instantánea de las fuerzas normales y tangenciales o del desplazamiento.

Una de las restricciones que formará constantemente parte de los modelos tangenciales es la ley de Amontons-Coulomb, clásica en el estudio de la fricción entre sólidos, planteada acá como:

$$\|\mathbf{F}_{t,ij}\| \leq \mu_s \|\mathbf{F}_{n,ij}\|, \quad (3.13)$$

donde μ_s corresponde a un coeficiente de fricción. La literatura no distingue respecto a un coeficiente de fricción estático y uno dinámico, simplemente consiste en una constante que permite limitar la componente tangencial de la fuerza.

Una vez la fuerza tangencial ha alcanzado el límite se inicia el deslizamiento relativo entre las superficies, con lo cual se superpone un esfuerzo

tangencial asociado al roce en la zona de contacto. Destaca que el comportamiento de la fuerza tangencial dependerá de toda la historia del contacto entre ambas superficies.

Finalmente, de acuerdo a Maw et al. (1976) y Maw et al. (1977), dos números adimensionales serán de particular importancia en las colisiones oblicuas, estos son los «*ángulos de incidencia y rebote local normalizado*» ψ_{in} y ψ_{out} :

$$\psi_{in} = \frac{2(1-\nu)v_{t,in}}{\mu_s(2-\nu)v_{n,in}}, \quad (3.14)$$

$$\psi_{out} = \frac{2(1-\nu)v_{t,out}}{\mu_s(2-\nu)v_{n,in}}, \quad (3.15)$$

donde los subíndices «*in*» y «*out*» hacen referencia a las situaciones anteriores y posteriores al choque (incidencia y rebote). El otro número adimensional de relevancia es el «*radio de giro modificado*» χ :

$$\chi = \frac{(1-\nu)(1+K^{-2})}{2-\nu} \quad (3.16)$$

en la cual K representa al radio de giro adimensional, definido como:

$$K^2 = \frac{\int r^2 \rho_s dV}{R_p \int \rho_s dV}, \quad (3.17)$$

siendo $K^2 = 2/5$ para una esfera homogénea. A partir de los números anteriormente expuestos, Maw et al. describen los siguientes regímenes de comportamiento:

- Para pequeños ángulos de incidencia $\psi_{in} \leq 1$, la carga normal F_n es mucho mayor a la tangencial F_t . Las partículas chocan y a lo largo del contacto se mantienen unidas, sin desplazamiento relativo entre ellas.
- En un rango intermedio de ángulos de incidencia, $1 < \psi_{in} \leq (4\chi - 1)$, la colisión comienza con un deslizamiento no despreciable que decae antes de que acabe la interacción.
- Finalmente, para $\psi_{in} > (4\chi - 1)$, hay un notable deslizamiento entre las partículas y la fuerza tangencial se mantiene en su límite determinado por la ley de Amontons-Coulomb (3.13).

Modelos combinados para colisiones secas

Cundall and Strack (1979) en su trabajo proponen al hoy denominado modelo de esferas suaves, basado en los modelos de contacto descritos anteriormente y que aplica simplificaciones dedicadas a reducir el costo computacional asociado al cálculo de las interacciones entre partículas. Asume por ejemplo, que la influencia de una partícula al chocar con otras se limita únicamente a aquellas que están en un contacto directo con ella, evitando así complejas cadenas de contacto que se darían en caso de calcular la interacción completa.

La principal ventaja de este modelo consiste en que tolera múltiples colisiones simultáneas y resuelve su desarrollo en el tiempo, a diferencia del modelo de esferas duras que comúnmente solamente permite el cálculo de colisiones binarias instantáneas.

Normalmente utilizan un paso de tiempo constante para la integración de las ecuaciones de movimiento para las partículas. Se permite un traslape entre las partículas a partir del cual se determinan las fuerzas repulsivas que rigen el contacto.

Estructuralmente, las fuerzas de contacto tangencial y normal se modelan mediante sistemas de resorte y amortiguadores, de la forma:

$$\mathbf{F}_{n,ij}^c = -k_n \delta_n \mathbf{n}_{ij} - \eta_n \mathbf{v}_{n,ij}, \quad (3.18)$$

$$\mathbf{F}_{t,ij}^c = \begin{cases} -k_t \delta_t \mathbf{t}_{ij} - \eta_t \mathbf{v}_{t,ij} & \|\mathbf{F}_{t,ij}^c\| < \mu_s \|\mathbf{F}_{n,ij}^c\|, \\ -\mu_s \|\mathbf{F}_{n,ij}^c\| \mathbf{t}_{ij} & \|\mathbf{F}_{t,ij}^c\| \geq \mu_s \|\mathbf{F}_{n,ij}^c\|. \end{cases} \quad (3.19)$$

En las ecuaciones anteriores k y η corresponden a las constantes de elasticidad y disipación respectivamente. Las últimas constantes, por ejemplo, en el modelo original están enunciadas de la siguiente forma

$$\eta_n = \frac{-2 \ln e_n \sqrt{m k_n}}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e_n}} \quad (3.20)$$

$$\eta_t = \frac{-2 \ln e_t \sqrt{\frac{2}{7} m k_t}}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e_t}} \quad (3.21)$$

donde e_n y e_t corresponden a coeficientes de restitución en las componentes normales y tangenciales, respectivamente.

Muchos modelos contemporáneos como los de Kempe and Fröhlich (2012a) y Costa et al. (2015) utilizan formulaciones alterativas para las constantes

asociadas a las ecuaciones (3.18) y (3.19) en comparación a aquellas dadas por Cundall and Strack (1979). En ellos prima el optimizar el recurso computacional antes que la fidelidad física al representar el fenómeno en cuestión.

3.3.2. Colisiones en un medio viscoso

Salvo en ciertos casos específicos, una partícula sólida que esté en movimiento siempre estará rodeada por algún fluido viscoso, como pueden ser el aire o el agua. La presencia de éste influirá a través una continua disipación de energía cinética a lo largo del movimiento de la partícula y otros efectos más complejos que se derivarán de la interacción en la interfaz de ambas fases. Los efectos producidos entre el fluido intersticial y la partícula son denominados «*efectos de lubricación*».

Efectos de lubricación

Considérese la aproximación de una esfera rígida en dirección normal hacia una pared sólida estática, estando la primera rodeada de un fluido viscoso. Para desplazarse, el cuerpo móvil debe empujar al fluido que está por delante suyo, movimiento que naturalmente será resistido por aquél que es sacado del reposo. A medida que la distancia a la pared se hace más pequeña, el fluido intersticial será comprimido y expulsado de la región con una mayor violencia, lo que incidirá en que el movimiento de la esfera sea resistido con una mayor fuerza. Este fenómeno y otros de la misma naturaleza son denominados *efectos de lubricación*.

La lubricación como fenómeno suele descomponerse en componentes normales y tangenciales, la última de las cuales será despreciada siguiendo los argumentos de (Kempe and Fröhlich, 2012a) quienes retoman estudios afines cuyas conclusiones indican que la contribución normal será mucho mayor a la tangencial en los flujos de suspensiones densas de partículas.

En cuanto a la lubricación normal, los estudios esenciales se remontan a Brenner (1961) y posteriormente Davis et al. (1986) quienes finalmente derivan la relación:

$$F_{lub,n} = -\frac{6\pi\nu_f\rho_f v_{n,ij}}{\delta_{n,ij}} \left(\frac{R_i R_j}{R_i + R_j} \right)^2, \quad (3.22)$$

enunciada para las partículas esféricas de radio R_i y R_j y donde el caso particular de una superficie plana inmóvil, *i.e.* una pared, puede ser considerado mediante $R_j \rightarrow \infty$.

Es evidente que la ecuación (3.22) divergirá cuando la distancia normal entre los cuerpos tienda a cero, $\delta_{n,ij} \rightarrow 0$. No obstante, este resultado puede ser rápidamente invalidado debido a que la consideración elemental de un medio continuo es válida hasta un determinado umbral de aplicación que exige distancias no-nulas.

Lo anterior expone una dificultad que tendrá que ser considerada en la posterior composición de un código, pues el caso de $\delta_{n,ij} = 0$ corresponderá a una colisión binaria entre dos cuerpos, que resulta elemental en una suspensión densa.

Destaca que la fuerza de lubricación para un par de esferas (3.22) es muy semejante al arrastre de Stokes para una esfera F_D , el cual es:

$$F_D^{(esf)} = 6\pi\nu_f\rho_fU_\infty D, \quad (3.23)$$

corregida mediante un término proporcional a la distancia entre ambos cuerpos. Nótese que U_∞ es la velocidad uniforme del flujo aguas arriba. Lo anterior se presenta como relevante en cuanto, al conocimiento del autor, no existe una formulación desarrollada para la fuerza de lubricación entre dos partículas circulares (*i.e.* el caso bidimensional) que se aproximan.

Para el caso del arrastre sobre un cuerpo circular, se tiene una solución obtenida originalmente por Lamb (1911) y reformulada posteriormente por Proudman and Pearson (1956) en el marco de las *matched asymptotic expansions*. La expresión obtenida por estos investigadores es:

$$F_D^{(cir)} = \frac{4\pi\nu_f\rho_fU_\infty D}{1/2 - \gamma - \log(U_\infty R/2\nu_f)}, \quad (3.24)$$

donde γ es la constante de Euler–Mascheroni.

Capítulo 4

Modelación de los fenómenos

4.1. Introducción

Considérese una región del espacio Ω que en su interior alberga un cuerpo sólido Ω_s que será denominado como *fase sólida* o *discreta*. El complemento de esa región será un fluido que se asumirá newtoniano e incompresible, denotado Ω_f y denominado *fase de fluido* o *continua*.

El fluido que está en contacto directo con el cuerpo inmerso experimenta la denominada *condición de no-deslizamiento*, la cual exige que en la frontera del sólido $\partial\Omega_s$, el fluido posea una velocidad relativa nula ante ésta. En términos matemáticos:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{U}_s \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_s. \quad (4.1)$$

Para abordar este problema, generalmente el primer paso consiste en la discretización de la superficie del sólido en una malla apropiada que permita su representación numérica.

Posteriormente se ha de representar de manera apropiada a la fase del fluido. Un enfoque tradicional consiste en utilizar una malla adaptada al cuerpo (en inglés, *body-conformal grid*). En este caso, a partir de la malla del cuerpo sólido se genera una malla no necesariamente ortogonal que cubre el dominio asociado al fluido. La principal ventaja que presenta esta alternativa es la intuitiva imposición de la condición de no-deslizamiento pues bastará con exigir directamente la velocidad apropiada en la superficie sólida. Además permite realizar refinaciones locales para la captura de fenómenos intrincados como la capa límite.

Otra alternativa es utilizar una malla no adaptada al cuerpo (o en inglés, *non-body conformal grid*). En este caso se procede a discretizar el dominio

general Ω sin considerar de manera especial al sólido inmerso, generando una malla sencilla que permite el uso de algoritmos rápidos que están bien establecidos.

La dificultad que aquí surge es el como imponer apropiadamente la condición de no-deslizamiento sobre el fluido, puesto que no hay una conexión intuitiva entre los nodos que representan al sólido y aquellos que representan al fluido. Para hacerlo, habrá que modificar las ecuaciones esenciales que rigen el comportamiento del fluido lo que da lugar al método de la frontera inmersa (en inglés, *immersed boundary method*).

4.2. Modelación de flujos particulados

La presente problemática, «¿cómo modelar una suspensión sólida?» dependerá por supuesto de la diversidad de escalas que se desea estudiar. El concentrado de cobre proveniente de la minería es muy distinto de los escombros que pueden ser arrastrados por un río o de la caída de granizo durante una tormenta; las diferencias radican en parámetros como la concentración del medio discreto, la razón entre las densidades entre ambas fases, el número de Stokes de las partículas y un sin fin de otros números adimensionales que podrían ser invocados de acuerdo al caso que se esté discutiendo.

En la modelación de suspensiones densas existen dos grandes familias que engloban la mayoría de las distintas metodologías disponibles que se utilizan en la comunidad científica-ingenieril.

La primera corresponde a los métodos de «Euler-Euler» donde tanto fluido como las partículas en suspensión, son consideradas como dos continuos interpenetrantes que coexisten en el dominio de la simulación. Para esto, el espacio es discretizado en una malla donde la presencia de las fases es cuantificada -generalmente- por algún parámetro que indique la fracción sólida (o su análoga) para cada nodo o celda simulada.

Posteriormente se resuelven ecuaciones de medio continuo para cada fase, semejantes en estructura a las ecuaciones de Navier-Stokes, cuya formulación requiere usualmente la introducción de modelos de clausura adicionales para cuantificar términos que surgen de la simplificación de las fases sólidas como las interacciones entre partículas. En efecto, la identidad de cada partícula es eliminada en pos de generar una «fracción media de sólidos» que se transporta junto al fluido. Estos modelos suelen ser denominados en inglés como «*two-fluid models*» (TFM) una revisión de la formulación de éstos puede ser hallada en van Wachem and Almstedt (2003).

La segunda familia es la de los métodos de «Euler-Lagrange», donde

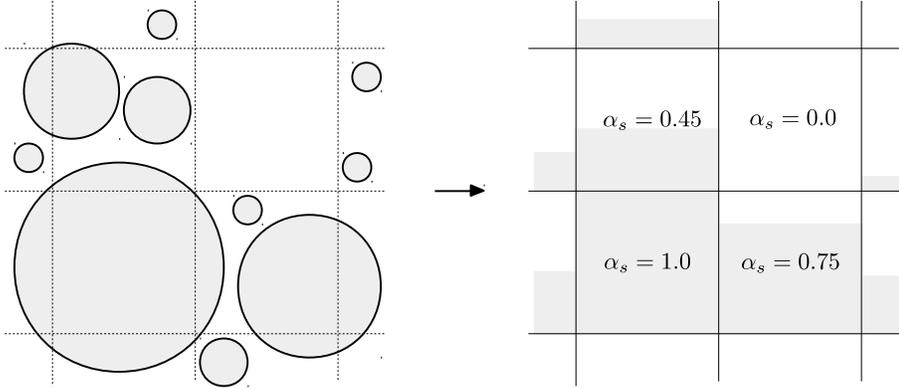


Figura 4.1: Ilustración del modelo de dos fluidos (*two fluid model*). Las partículas son reemplazadas por una fracción sólida que es transportada como un escalar dentro del dominio de la simulación. La presencia de partículas en cada celda es representada mediante la fracción sólida α_s .

el fluido es modelado siguiendo una formulación euleriana convencional y las partículas sólidas son estudiadas resolviendo las ecuaciones de Newton para el movimiento y donde, usualmente, hace falta introducir también la modelación de las colisiones entre estos cuerpos.

Habrán distinciones dentro de estos métodos de acuerdo a cual sea la longitud característica que se considere para la partícula. En el caso extremo donde el largo característico de las partículas se considera despreciable, se habla del «*point-particle approach*» (PPA). Esta formulación considera a la partícula como un punto que es advechado junto al fluido y donde las interacciones hidrodinámicas que se experimentan son modeladas mediante múltiples fuerzas como la «*masa agregada*», «*fuerza de Basset*», «*arrastre de Stokes*» y otras cuya formulación puede encontrarse en Crowe et al. (2012) y en Michaelides (2003). Estos modelos son también denominados «*unresolved*» pues las escalas pertinentes a la partícula, que en la práctica jamás serán puntuales, no son resueltas sino que sus efectos se asumen despreciables o contenidos en el mecanismo de feedback donde el fluido recibe una fuerza equivalente a la experimentada por las partículas pero «suavizada» mediante alguna regla apropiada para evitar inestabilidades y en dirección opuesta.

Naturalmente, si se habla una categoría de modelos «*unresolved*» existe también otra categoría análoga denominada «*resolved*». En ella el tamaño

de la partícula se encuentra al menos un orden de magnitud por sobre el tamaño de la malla utilizada en la discretización del fluido. Siguiendo la clasificación de Haeri and Shrimpton (2012) se establecen las categorías de «*body-conformal methods*» como aquellos donde la malla del fluido se modifica a lo largo del tiempo y «*fixed-mesh methods*» donde la malla permanece sin modificación durante la simulación.

Dentro de los primeros, destacan los modelos denominados «*Arbitrary Lagrangian-Eulerian*» como el desarrollado por Hu et al. (2001) donde se utiliza una formulación a partir del método de elementos finitos para simular partículas rígidas sumergidas en el fluido. La malla se conforma alrededor de los objetos inmersos que se desplazan como un cuerpo rígido y una vez que éstos se han desplazado lo suficiente como para que la malla esté distorsionada por sobre una tolerancia, se procede a un remallado e interpolación hacia las nuevas condiciones. Estos pasos asociados a los cambios en la malla resultan especialmente problemáticos en implementaciones paralelizadas, pues requieren una importante destinación de recursos a analizar continuamente el estado del dominio, la distribución de los nuevos nodos dentro los de procesadores y la generación de nuevos mallados automatizados, procedimientos con una mala eficiencia en paralelo. No obstante, las mallas adaptadas a los cuerpos permiten una buena representación de la capa límite alrededor de las superficies y permiten refinaciones de malla de manera local sin mayores inconvenientes.

Por otra parte, los *fixed-mesh methods* giran en torno a la idea de resolver el problema en una malla euleriana fija en el tiempo, que puede ser tanto estructurada como no-estructurada, y donde se definen objetos dentro de ésta distribuyendo puntos lagrangianos dentro del espacio que no necesariamente deben coincidir con los nodos eulerianos. Utilizan generalmente un término exógeno a las ecuaciones de Navier-Stokes dentro de éstas para introducir los efectos del sólido de manera local a la fase de fluido. La clasificación de Haeri and Shrimpton (2012) hace distinción entre dos familias, «*Distributed Lagrange Multipliers/Fictitious Domain Methods*» (FD) y «*Immersed Boundary Methods*» (IB).

Los métodos FD consisten en una amplia clase de técnicas de solución de ecuaciones diferenciales parciales donde un dominio complejo está contenido dentro de uno más grande pero más sencillo (de ahí el denominado dominio ficticio) con las condiciones de contorno de aquél original aplicadas al nuevo dominio. Glowinski et al. (1999) introdujeron el uso de multiplicadores de Lagrange distribuidos dentro de una formulación que utiliza elementos finitos para las ecuaciones de Navier-Stokes. Posteriormente Hu et al. (2001) introdujeron una modificación en la formulación evitando el cálculo explícito

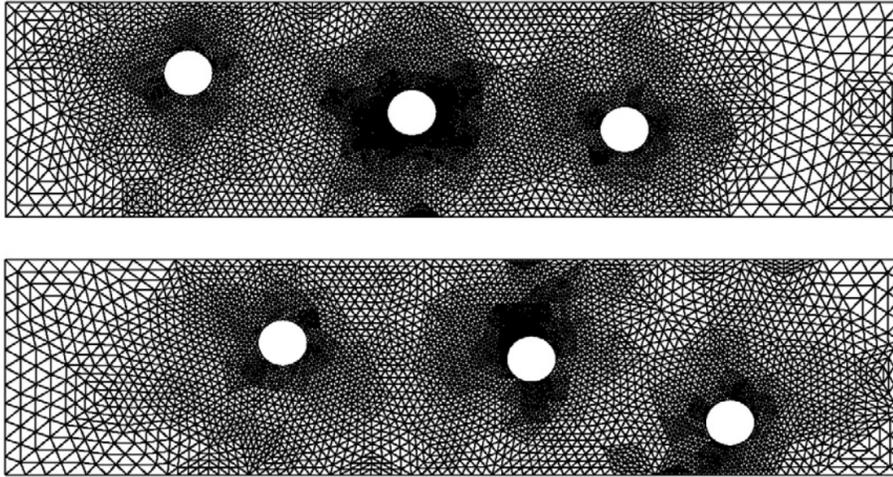


Figura 4.2: El movimiento de las partículas exige constantemente un remallado en los métodos de malla móvil. Extraído de Haeri and Shrimpton (2012).

de los multiplicadores de Lagrange e introdujeron fuerzas de cuerpo para la aplicación de la restricción de rigidez en el cuerpo sumergido. Aplicaciones del método pueden verse en por ejemplo en Sharma and Patankar (2005).

Los métodos IB utilizan un término adicional en las ecuaciones de Navier-Stokes que contiene los efectos de la superficie sólida inmersa en el fluido a través del cual se impone de manera local la condición de no-deslizamiento. A diferencia de los métodos anteriores, en este grupo sólo se imponen los efectos sobre el campo de velocidad, sin considerar la naturaleza física del objeto inmerso como en los métodos FD, donde se considera la totalidad del sólido, como su densidad y el movimiento como cuerpo rígido en por completo. Fueron introducidos por Peskin (1972) para la simulación del flujo de sangre en las paredes del corazón y desde entonces han hallado una fuerte aplicación en la simulación de suspensiones sólidas por ofrecer un razonable equilibrio entre precisión, eficiencia computacional y facilidad de implementación.

En particular, resulta de interés la línea de investigación desarrollada a partir de la publicación de Uhlmann (2005) –calificada como un avance mayor en el desarrollo de los métodos de la frontera inmersa según Prosperetti (2015)–, donde se combina el «*forzado directo*» de Fadlun et al. (2000) con las funciones delta regularizadas de Peskin (1972), resultando en una metodología que ha sido utilizada, por ejemplo, para simular miles de partículas

en un flujo dentro de un canal cuyo número de Reynolds es lo suficientemente alto como para que aparezca turbulencia espontánea en Uhlmann (2008). Otro trabajo de gran escala consiste en aquél de Picano et al. (2015) quienes simulan un canal de hasta 10000 partículas de densidad neutra para tres valores de fracción sólida α_s oscilantes entre 0.05 y 0.20. Otras metodologías IB han sido propuestas y no se ahondará en ellas por escapar de los objetivos del presente trabajo. Algunas de ellas son la de Pinelli et al. (2010) para el uso de mallas no-ortogonales y refinaciones locales o la de Feng and Michaelides (2004) quienes acoplan la formulación de IB al método «lattice-Boltzmann», que será referido a continuación.

Regresando a los métodos para la simulación de suspensiones, se destaca finalmente a una familia de métodos que no calza dentro de la categorización inicial de Euler-Euler y de Euler-Lagrange cuya relevancia se ha hecho notar en los últimos años, el denominado método de «*lattice-Boltzmann*» (LB). La idea básica consiste en utilizar modelos cinéticos simplificados que incorporan la física esencial de los procesos de pequeña escala (microscópicos y mesoscópicos) de modo que las propiedades macroscópicas promediadas obedezcan las ecuaciones convencionales de dicha escala (NS) (Chen and Doolen, 1998). Ladd and Verberg (2001) ofrecen una revisión del desarrollo de los métodos LB y su prometedora aplicación ante los problemas de flujos particulados.

4.3. Método IB de Uhlmann

En general, los métodos IB deben resolver un set de ecuaciones de Navier-Stokes modificadas por medio de un término fuente adicional \mathbf{f} , denominado comúnmente como «*término de forzado*», asociado a la restricción de continuidad. En el caso de un flujo incompresible, éstas corresponden a las siguientes:

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p &= \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \end{aligned} \tag{4.2}$$

La metodología propuesta por Uhlmann (2005) destaca por su enfoque para la modelación de flujos particulados y la sencillez de los algoritmos propuestos. Las ecuaciones del continuo son discretizadas siguiendo una metodología de volúmenes finitos incorporando los pasos ya clásicos de una corrección por presión para calcular el campo de velocidades final. El algoritmo contiene además, los pasos necesarios para acoplar los efectos de

los contornos de las partículas sobre el campo de velocidades del fluido a través de lo denominado en la literatura como «*direct discrete approach*» o un «enfoque directo y discreto» para la formulación de \mathbf{f} .

Respecto al último alcance, se habla de un enfoque directo debido a que utiliza la información ya disponible en el instante de cálculo para la determinación del forzado necesario, sin la necesidad de acudir a constantes «artificiales» que requieran calibración o de algún sub-algoritmo iterativo, por ejemplo. Por otra parte, se refiere a un enfoque discreto debido a que es formulado *a posteriori* de la discretización de las ecuaciones (4.2) lo cual –según Mittal and Iaccarino (2005)– permite una descripción más aguda de la interfaz de la partícula y evita la aparición de nuevas restricciones para la estabilidad asociadas a la representación del sólido.

Al existir simultáneamente dos mallas de distinta naturaleza, la euleriana y la lagrangiana, se hace necesario un mecanismo de traspaso de información entre ambas estructuras. Cuando los nodos de ambas no calzan, algo muy usual al tener objetos sumergidos que se mueven arbitrariamente, es necesario una aplicación consistente en el tiempo y cuya programación utilice eficientemente los recursos computacionales disponibles. En esta formulación se utilizan funciones «delta de Dirac regularizadas» $\delta(\mathbf{r})$ del mismo modo en que originalmente lo realizó Peskin (1972).

Éstas funciones son semejantes a la función delta de Dirac, orientadas para ser utilizadas en dominios discretos; son continuamente diferenciables permitiendo un suave traspaso de información entre los dominios en comparación con una aproximación lineal, por ejemplo, conservando tanto la fuerza como el torque transferido al fluido. Estas y otras propiedades son discutidas en la publicación original de Uhlmann (2005).

Es de vital importancia su denominado «ancho de banda» que corresponde al número de nodos dentro de los cuales posee un valor no-nulo. En particular, Uhlmann opta por el uso de «función compacta de 3 nodos» propuesta por Roma et al. (1999). En su versión tridimensional, puede ser resumida en las siguientes ecuaciones:

$$\delta^{(3d)}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_l) = \delta(x - X_l)\delta(y - Y_l)\delta(z - Z_l), \quad (4.3a)$$

$$\delta(x - X_l) = \frac{1}{h}\psi\left(\frac{x - X_l}{h}\right), \quad (4.3b)$$

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{1}{3}(1 + \sqrt{-3r^2 + 1}), & |r| \leq 0.5 \\ \frac{1}{6}(5 - 3|r| - \sqrt{-3(1 - |r|^2 + 1)}), & 0.5 \leq |r| \leq 1.5 \\ 0, & |r| > 1.5. \end{cases} \quad (4.3c)$$

Donde $\mathbf{x} = (x, y, z)$ es la posición de algún nodo euleriano, $\mathbf{X}_l = (X_l, Y_l, Z_l)$ es la posición del nodo lagrangiano l -ésimo, h es el espaciamiento convencional y r una variable de paso. Nótese un símil bidimensional $\delta^{(2d)}$ se construye siguiendo la misma lógica mediante el producto de dos funciones δ como las definidas en (4.3b).

Cabe destacar que los nodos lagrangianos están distribuidos solamente alrededor del contorno del sólido y no se distribuyen en el interior de éstos. Esto se debe a razones de eficiencia computacional en cuanto Uhlmann (2005) concluye la repartición de puntos alrededor del total del cuerpo sumergido no produce diferencias significativas en los resultados obtenidos.

El algoritmo de Uhlmann trata a los términos convectivos mediante un esquema Runge-Kutta de bajo almacenamiento y de tercer orden mientras que los términos viscosos son discretizados mediante el método de Crank-Nicolson, asegurando una precisión de segundo orden en el tiempo. Como ya se comentó anteriormente, para la asegurar un campo de velocidades solenoidal se utiliza un método de corrección por presión. Las derivadas espaciales se discretizan utilizando diferencias finitas de segundo orden en una malla desplazada o «*staggered*». Detalles respecto a la formulación del siguiente esquema pueden hallarse en el apéndice de este texto.

Las ecuaciones finales para resolver la fase continua, para el q -ésimo paso de Runge-Kutta son las siguientes:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^{q-1} + \Delta t (2\alpha_q \nu \nabla^2 \mathbf{u}^{q-1} - 2\alpha_q \nabla p^{q-1} - \gamma_q [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{q-1} - \zeta_q [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{q-2}), \quad (4.4)$$

$$\tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{X}_l) = \sum \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \delta^{(3d)}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_l) h^3, \quad 1 \leq l \leq N_L, \quad (4.5)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}_l) = \frac{\mathbf{U}^{(d)}(\mathbf{X}_l) - \tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{X}_l)}{\Delta t}, \quad \forall l, \quad (4.6)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \sum_{l=1}^{N_L} \mathbf{F}(\mathbf{X}_l) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}_l) \Delta V_l, \quad (4.7)$$

$$\nabla^2 \mathbf{u}^* - \frac{\mathbf{u}^*}{\alpha_q \nu \Delta t} = -\frac{1}{\nu \alpha_q} \left(\frac{\tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} + \mathbf{f}^q \right) + \nabla^2 \mathbf{u}^{q-1}. \quad (4.8)$$

$$\nabla^2 \phi^q = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{2\alpha_q \Delta t}, \quad (4.9)$$

$$\mathbf{u}^q = \mathbf{u}^* - 2\alpha_q \Delta t \nabla \phi^q, \quad (4.10)$$

$$p^q = p^{q-1} + \phi^q - \alpha_q \Delta t \nu \nabla^2 \phi^q. \quad (4.11)$$

La ecuación (4.4) corresponde a una aproximación preliminar $\tilde{\mathbf{u}}$ al campo de velocidades del fluido donde se debe notar que no existe una incidencia directa de la presencia de sólidos. Las constantes $\alpha_q = (\frac{8}{15}, \frac{5}{12}, \frac{3}{4})$, $\gamma_q = (\frac{4}{15}, \frac{1}{15}, \frac{1}{6})$ y $\zeta_q = (0, \frac{-17}{60}, \frac{-5}{12})$ provienen de la discretización temporal utilizada, expuesta en Rai and Moin (1991).

Posteriormente, en (4.5) se procede a transportar la información euleriana del campo $\tilde{\mathbf{u}}$ hacia su símil lagrangiano $\tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{X}_l)$ a través de la función delta de Roma. Esta operación se realiza para cada nodo lagrangiano y para cada partícula existente en el dominio. En (4.6) se determinará al término de forzado lagrangiano $\mathbf{F}(\mathbf{X}_l)$ por medio de la diferencia entre el campo de velocidad preliminar $\tilde{\mathbf{U}}$ y la velocidad prescrita para el nodo l -ésimo $\mathbf{U}^{(d)}(\mathbf{X}_l)$. Este último valor se conoce como una condición inicial del problema o producto de la integración temporal del movimiento de la partícula obtenida en la anterior iteración de Runge-Kutta.

De forma análoga a como fue realizado anteriormente, en (4.7) la información lagrangiana se «esparcirá» desde $\mathbf{F}(\mathbf{X}_l)$ hacia los nodos eulerianos que se encuentren en su entorno por medio de las funciones delta regularizadas, generando en el proceso el campo euleriano \mathbf{f} , que contiene la información necesaria para corregir el campo de velocidades preliminar $\tilde{\mathbf{u}}$. Esta corrección es realizada resolviendo la ecuación de Helmholtz (4.8) a través de un «solver» de ecuaciones elípticas apropiado. Como resultado de este último paso se obtiene el campo de velocidades \mathbf{u}^* , el cual si contiene los efectos de la condición de no-deslizamiento alrededor de las partículas pero que no necesariamente es solenoidal, *i.e.*, no necesariamente satisface (2.2).

Para solucionar esto, se determina un campo escalar de «pseudo-presión» ϕ a través de una ecuación de Poisson (4.9). Este escalar permite corregir el campo de velocidad de la fase de fluido (4.10) y actualizar simultáneamente la presión (4.11). De este modo, se cumple el ciclo q -ésimo de Runge-Kutta para el fluido y se procede a integrar el movimiento de la fase sólida.

En su formulación original, Uhlmann propone el siguiente esquema – acoplado al q -ésimo paso de Runge-Kutta– para la integración temporal del movimiento de la fase sólida:

$$\frac{\mathbf{u}_c^q - \mathbf{u}_c^{q-1}}{\Delta t} = -\frac{\rho_c}{V_c(\rho_d - \rho_c)} \mathcal{F}^q + 2\alpha_q \mathbf{g}, \quad (4.12)$$

$$\frac{\mathbf{x}_c^q - \mathbf{x}_c^{q-1}}{\Delta t} = \alpha_q (\mathbf{u}_c^q + \mathbf{u}_c^{q-1}). \quad (4.13)$$

$$\frac{\omega_c^q - \omega_c^{q-1}}{\Delta t} = \frac{\rho_f}{I_c} \mathcal{T}^q + \frac{\rho_f}{I_c} \frac{\mathcal{I}^q - \mathcal{I}^{q-1}}{\Delta t}, \quad (4.14)$$

donde los símbolos F^q , \mathcal{T}^q y \mathcal{I}^q están definidos de la siguiente forma:

$$\mathcal{F}^q = \sum_{l=1}^{N_L} \mathbf{F}^q(\mathbf{X}_l) \Delta V_l, \quad (4.15)$$

$$\mathcal{T}^q = \sum_{l=1}^{N_L} (\mathbf{X}_l - \mathbf{x}_c) \times \mathbf{F}^q(\mathbf{X}_l) \Delta V_l, \quad (4.16)$$

$$\mathcal{I}^q = \int_{\Omega_s} ((\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \mathbf{u}) d\mathbf{x}. \quad (4.17)$$

Destaca la indeterminación de (4.12) cuando $\rho_d = \rho_c$ que ha sido estudiada en estudios posteriores como los de Kempe and Fröhlich (2012a), por ejemplo. La constante V_c es el volumen asociado a un nodo lagrangiano y $V_c = h^2$ en dos dimensiones y $V_c = h^3$ en tres.

El término \mathcal{I}^k corresponde a una compensación asociada al movimiento del campo de velocidades al interior de la partícula que se contradice con una suposición de movimiento de cuerpo rígido realizada en el desarrollo de estas ecuaciones. Para su determinación se utiliza el procedimiento de Kempe and Fröhlich (2012a) que consiste en la aplicación de una estrategia del método de «*cut-cell*»; los detalles al respecto de esta aplicación pueden ser encontrados en el apéndice de este documento.

De acuerdo a Uhlmann, el método IB propuesto no interfiere con la estabilidad del esquema de Runge-Kutta utilizado y, de este modo, bastará para una integración estable el mantener un CFL inferior al límite teórico de $\sqrt{3}$.

Notar que se considerará la siguiente expresión para la determinación del número CFL para la estabilidad:

$$\text{CFL} = \frac{\Delta t}{h} \text{máx}(|u| + |v|), \quad (4.18)$$

donde u y v son las componentes del campo de velocidades bidimensional. La función $\text{máx}()$ hace referencia a que se habrá de evaluar el campo de velocidades completo y se retendrá el máximo valor que tome el argumento dentro del dominio de la simulación.

Capítulo 5

Código bidimensional

La implementación bidimensional del código ha sido desarrollada en el lenguaje Fortran de manera secuencial, separado en distintas versiones de acuerdo a las condiciones de contornos exigidas por el problema a resolver.

5.1. Dominio euleriano

Se considerará una región de dimensiones $[L_x \times L_y]$. El dominio rectangular descrito es discretizado en N_x y N_y intervalos, para la dimensión indicada en el subíndice del símbolo según se indica en la figura (5.1). La formulación de Uhlmann propone que un espaciamiento idéntico en cada dirección por lo que las igualdades:

$$h = \frac{L_x}{N_x} \quad , \quad h = \frac{L_y}{N_y} \quad , \quad (5.1)$$

se deben considerar como una identidad.

Dentro de este dominio, las variables eulerianas se dispondrán mediante un arreglo de malla desplazada o, en inglés, «*staggered mesh*», según el cual y para el caso bidimensional, coexistirán tres mallas simultáneamente donde serán resueltas las ecuaciones del algoritmo.

La figura (5.2) busca explicar lo anterior. Se puede observar en ella como en el centro del cuadrado existe un rombo, el que simboliza la ubicación de variables escalares como la presión p_{ij} . En cada lado del cuadrado estará definida una componente de la velocidad, u_{ij} y v_{ij} , constituyendo un arreglo equivalente al de una formulación mediante volúmenes finitos en dos dimensiones.

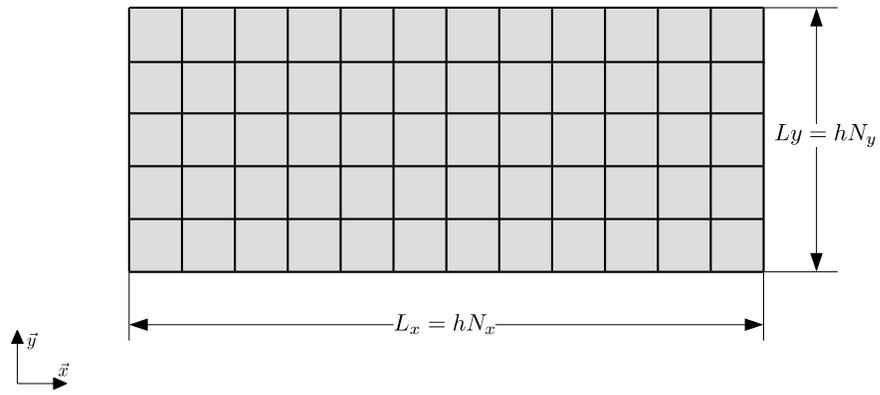


Figura 5.1: Exposición del dominio euleriano general utilizado para las simulaciones bidimensionales.

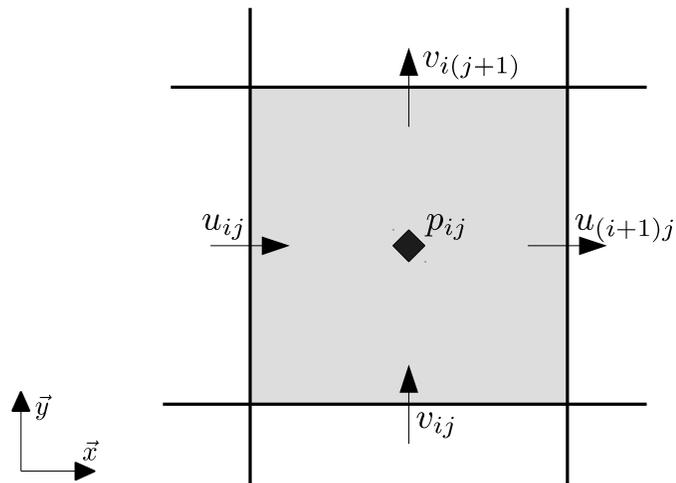


Figura 5.2: Disposición de las variables eulerianas dentro de un volumen de control.

Esta distribución de las variables en el espacio condiciona el tamaño de las estructuras de datos que serán utilizadas posteriormente en el código. Al estar centrados en cada volumen de control, los campos como la presión p y la «pseudo-presión» ϕ estarán definidas en arreglos de tamaño de $[N_x, N_y]$. Por otra parte, las componentes del vector velocidad $\mathbf{u} = (u, v)$ estarán definidas en arreglos de la forma $[N_x + 1, N_y]$ para u y $[N_x, N_y + 1]$ para v . Todos los demás campos vectoriales provenientes de una cantidad euleriana estarán definidos de manera análoga, según sea su componente.

5.2. Dominio lagrangiano

Por «dominio lagrangiano» se hace referencia a las partículas sólidas que se representan mediante el método de la frontera inmersa. Para manifestar sus efectos dentro del código, se distribuyen los «marcadores lagrangianos», conjuntos de puntos distribuidos bajo alguna regla que describen el contorno del sólido a representar. La cantidad de partículas a ubicar es un número entero definible con plena libertad por parte del usuario.

La geometría elemental con la que se trabaja es la circunferencia pues ésta es la figura canónica utilizada para la representación de sedimentos y además, debido a su absoluta simetría, evita la necesidad de calcular y almacenar la orientación de esta figura a lo largo del tiempo. Sin desmedro de lo anterior, también es posible representar otras figuras más complejas aunque éstas deberán permanecer estacionarias, o modificar el código base para almacenar y actualizar la orientación.

El criterio básico para la distribución de los nodos a lo largo del contorno indica que la distancia entre nodos contiguos debe ser aproximadamente h . Uhlmann (2005) estima que, para una geometría circular de radio R , la cantidad de nodos a ubicar para su correcta representación es:

$$N_L \approx 2\pi \frac{R}{h}. \quad (5.2)$$

Sabiendo el número de marcadores que se deben distribuir, el problema de cómo deben ser distribuidos los nodos lagrangianos es elemental. Utilizando las funciones trigonométricas *seno* y *coseno*, es posible distribuir puntos de manera regular a lo largo de la circunferencia de radio R siguiendo la fórmula:

$$\begin{aligned}
X(i) &= R \cos\left(\frac{2\pi}{N_L}(i-1)\right) & i = 1, \dots, N_L \\
Y(i) &= R \sin\left(\frac{2\pi}{N_L}(i-1)\right) & i = 1, \dots, N_L
\end{aligned} \tag{5.3}$$

donde $\mathbf{X}_i = (X_i, Y_i)$ es la posición, centrada en el origen, del marcador lagrangiano i -ésimo. Cada uno de los nodos anteriormente tendrá definida también una velocidad local $\mathbf{U}_i = (\mathbf{U}, \mathbf{V})$ por lo que la dimensión de cualquier arreglo lagrangiano poseerá como una de sus dimensiones N_L .

5.3. Discretización de las ecuaciones

Las ecuaciones del método de Uhlmann descritas en el capítulo anterior y sus respectivas variaciones serán analizadas dentro de la presente sección. Para facilitar la lectura se reescribirán cuando sean necesarias y serán agrupadas de acuerdo a su función dentro del código. El nombre que las ecuaciones reciben (por ejemplo, «*step a*») se debe a su denominación en la publicación original y al nombre que llevan dentro del código desarrollado.

5.3.1. Estimación del campo de fluidos preliminar: «*step a*»

La ecuación (5.4) es denominada «*step a*» y permite determinar un campo de flujo inicial $\tilde{\mathbf{u}}$ que aún no ha sido intervenido por la presencia de la fase sólida dentro del presente *timestep*.

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^{q-1} + \Delta t(2\alpha_q \nu \nabla^2 \mathbf{u}^{q-1} - 2\alpha_q \nabla p^{q-1} \\
- \gamma_q [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{q-1} - \zeta_q [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{q-2}).
\end{aligned} \tag{5.4}$$

Ésta será reescrita en términos de los operadores diferenciales \mathbb{L} , \mathbb{G} y \mathbb{C} , que consisten en el operador laplaciano, el gradiente y el convectivo respectivamente, de modo que para el q -ésimo paso de Runge-Kutta resultan en:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^{q-1} + \Delta t(2\alpha_q \nu \mathbb{L}(\mathbf{u}^{q-1}) - 2\alpha_q \mathbb{G}(p^{q-1}) \\
- \gamma_q \mathbb{C}(\mathbf{u}^{q-1}) - \zeta_q \mathbb{C}(\mathbf{u}^{q-2})).
\end{aligned} \tag{5.5}$$

El operador laplaciano \mathbb{L} aplicado a la componente u del campo de velocidades resulta en la ecuación:

$$\mathbb{L}(u) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (5.6)$$

la cual tras ser discretizada resulta en la expresión:

$$\mathbb{L}(u) \approx \frac{u_{(i-1)j} + u_{i(j-1)} - 4u_{ij} + u_{(i+1)j} + u_{i(j+1)}}{h^2}, \quad (5.7a)$$

y análogamente, al plantear lo mismo para la componente v se obtiene la ecuación:

$$\mathbb{L}(v) \approx \frac{v_{(i-1)j} + v_{i(j-1)} - 4v_{ij} + v_{(i+1)j} + v_{i(j+1)}}{h^2}, \quad (5.7b)$$

El gradiente \mathbb{G} se discretiza según la componente de $\tilde{\mathbf{u}}$ que se esté calculando, variando únicamente la dirección de la derivada. En el caso de estar calculando el término \tilde{u} , la ecuación a discretizar sería:

$$\mathbb{G}_u(p) = \frac{\partial p}{\partial x}. \quad (5.8)$$

En ese caso –y de acuerdo a la figura (5.3)– el valor del gradiente en el punto sería aproximado por:

$$\frac{\partial p}{\partial x} \approx \frac{p_{ij} - p_{(i-1)j}}{h}, \quad (5.9)$$

y, siguiendo el mismo proceder, al resolver la ecuación para \tilde{v} se deberá aproximar la cantidad $\partial p / \partial y$ según:

$$\frac{\partial p}{\partial y} \approx \frac{p_{ij} - p_{i(j-1)}}{h}. \quad (5.10)$$

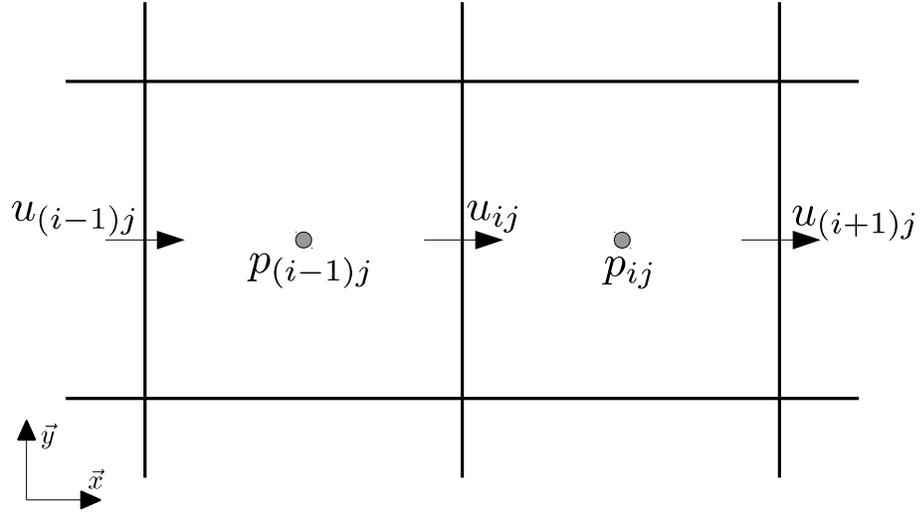
El término convectivo \mathbb{C} , a diferencia de los anteriores requiere de pasos adicionales asociados a la interpolación de puntos que no se encuentran definidos. Planteado para la determinación de la primera componente de $\tilde{\mathbf{u}}$, se expresa como:

$$\mathbb{C}(u) = \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y}. \quad (5.11)$$

El primer término del lado derecho de (5.11) es discretizado mediante:

$$\frac{\partial(uu)}{\partial x} \approx \frac{(uu)_{(i+1)j} - (uu)_{ij}}{h}, \quad (5.12)$$

Figura 5.3: Esquema para la discretización de $\partial p/\partial x$. Subíndice j omitido al no sufrir cambios.



donde la disposición en el espacio de las variables referidas puede ser visualizada en la figura (5.4). Se establece la aproximación $(uu)_{ij} \approx ((u_{(i+1)j} + u_{ij})/2)^2$, de modo que la diferencia planteada en (5.12) resulta en:

$$(uu)_{ij} - (uu)_{(i-1)j} \approx \left(\frac{u_{(i+1)j} + u_{ij}}{2} \right)^2 - \left(\frac{u_{(i-1)j} + u_{ij}}{2} \right)^2. \quad (5.13)$$

Expandiendo la ecuación anterior se obtiene la discretización para la aproximación del término en discusión:

$$\frac{\partial(uu)}{\partial x} \approx \frac{u_{(i+1)j}^2 + 2u_{(i+1)j}u_{ij} - 2u_{ij}u_{(i-1)j} - u_{(i-1)j}^2}{4h}. \quad (5.14)$$

Para el segundo término de la ecuación (5.11), $\partial(uv)/\partial y$, hace falta una interpolación más extensa. La figura (5.5) permite observar el esquema utilizado para la aproximación. La forma discreta de éste será:

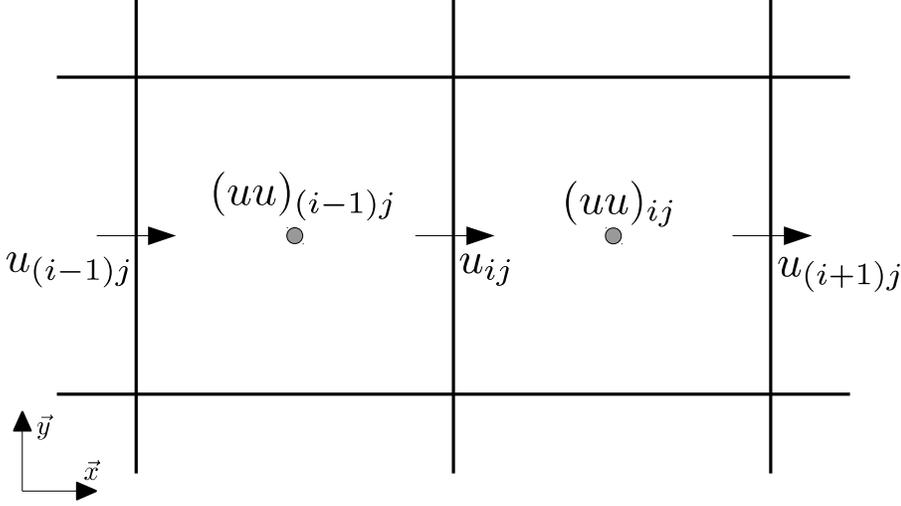


Figura 5.4: Esquema asociado a la ecuación (5.12) y posteriores.

$$\frac{\partial(uv)}{\partial y} = \frac{(uv)_{i(j+1)} - (uv)_{ij}}{h}. \quad (5.15)$$

Dado que los términos de forma (uv) no están disponibles directamente, se interpolará a partir de los nodos contiguos un valor aproximado, de modo que:

$$(uv)_{ij} \approx \left(\frac{u_{ij} + u_{i(j-1)}}{2} \right) \left(\frac{v_{(i-1)j} + v_{ij}}{2} \right). \quad (5.16)$$

Realizando un planteamiento análogo para $(uv)_{j+1}$ y reuniendo los términos semejantes, se obtiene la siguiente aproximación para la ecuación (5.15):

$$\begin{aligned} \frac{\partial(uv)}{\partial y} \approx & \left(\frac{1}{4h} \right) \left((u_{ij} + u_{i(j+1)})(v_{(i-1)(j+1)} + v_{i(j+1)}) \right. \\ & \left. - (u_{ij} + u_{i(j-1)})(v_{(i-1)j} + v_{ij}) \right). \end{aligned} \quad (5.17)$$

Sumando los resultados de la (5.17) junto a (5.14) se obtiene la aproximación para el término convectivo completo de la ecuación (5.11):

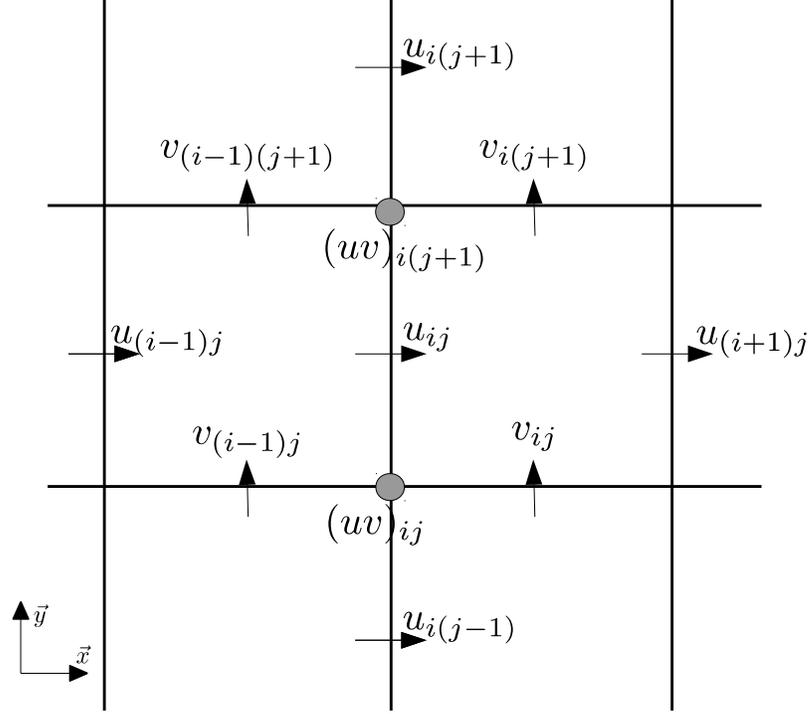


Figura 5.5: Esquema asociado a la ecuación (5.15) y posteriores.

$$\begin{aligned}
 \mathbb{C}(u) \approx & \left(\frac{1}{4h} \left(u_{(i+1)j}^2 + 2u_{(i+1)j}u_{ij} - 2u_{ij}u_{(i-1)j} - u_{(i-1)j}^2 \right) \right. \\
 & + (u_{ij} + u_{i(j+1)})(v_{(i-1)(j+1)} + v_{i(j+1)}) \\
 & \left. - (u_{ij} + u_{i(j-1)})(v_{(i-1)j} + v_{ij}) \right), \tag{5.18}
 \end{aligned}$$

La metodología anterior puede ser utilizada para discretizar el término convectivo aplicado a la segunda componente de la velocidad v , obteniendo la fórmula:

$$\begin{aligned} \mathbb{C}(v) \approx & \left(\frac{1}{4h} \right) \left((v_{i(j+1)}^2 + 2v_{i(j+1)}v_{ij} - 2v_{ij}v_{i(j-1)} - v_{i(j-1)}^2) \right. \\ & + (v_{ij} + v_{(i+1)j})(u_{(i+1)(j-1)} + u_{(i+1)j}) \\ & \left. - (v_{ij} + v_{(i-1)j})(u_{i(j-1)} + u_{ij}) \right). \end{aligned} \quad (5.19)$$

Reemplazando los resultados de las discretizaciones anteriores sobre (5.5), se obtiene la fórmula implementada en el código bidimensional, que por motivos de espacio y legibilidad no se reunirá acá en una sola expresión.

5.3.2. Determinación del campo de forzado euleriano: «*step b*» al «*step d*».

Los siguientes pasos buscan determinar la magnitud de un campo euleriano \mathbf{f} que corrija el campo de velocidades preliminar obtenido anteriormente. El primero de éstos, «*step b*» transforma el campo euleriano $\tilde{\mathbf{u}}$ en su variante lagrangiana $\tilde{\mathbf{U}}$ por medio de la función delta regularizada.

$$\tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{X}_l) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \tilde{\mathbf{u}}_{ij} \delta^{(2d)}(\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{X}_l) h^2, \quad 1 \leq l \leq N_L, \quad (5.20)$$

Al lector interesado en los detalles de la función delta y el cómo ésta fue programada en el código computacional se encuentran referidos en extenso en el apéndice del presente documento. En términos generales, la función delta en su formato bidimensional consiste en:

$$\delta^{(2d)}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_l) = \delta(x - X_l) \delta(y - Y_l), \quad (5.21a)$$

donde:

$$\delta(x - X_l) = \frac{1}{h} \psi\left(\frac{x - X_l}{h}\right), \quad (5.21b)$$

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{1}{3}(1 + \sqrt{-3r^2 + 1}), & |r| \leq 0.5 \\ \frac{1}{6}(5 - 3|r| - \sqrt{-3(1 - |r|^2 + 1)}), & 0.5 \leq |r| \leq 1.5 \\ 0, & |r| > 1.5. \end{cases} \quad (5.21c)$$

Tras haberse obtenido el campo $\tilde{\mathbf{U}}$, el «*step c*» consistirá en la determinación del forzado lagrangiano \mathbf{F} , definido de modo tal que:

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}_l) = \frac{\mathbf{U}^{(d)}(\mathbf{X}_l) - \tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{X}_l)}{\Delta t}, \quad \forall l. \quad (5.22)$$

Donde $\mathbf{U}^{(d)}$ puede provenir de un movimiento prescrito *a priori* por el usuario o ser resultado de la integración temporal del movimiento de la partícula en pasos de tiempo anteriores. Finalmente, el «*step d*» transforma a \mathbf{F} en su variante euleriana \mathbf{f} , nuevamente haciendo uso de la función delta regularizada (5.21a).

$$\mathbf{f}_{ij} = \sum_{l=1}^{N_L} \mathbf{F}(\mathbf{X}_l) \delta^{(2d)}(\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{X}_l) \Delta V_L, \quad (5.23)$$

donde se debe destacar que $\Delta V_L \approx h^2$ es un volumen (área) asociado a cada nodo lagrangiano.

5.3.3. Imposición de la condición de no-deslizamiento: «*step e*».

El «*step e*» utiliza la información recién computada para intervenir el campo de velocidades preliminar $\tilde{\mathbf{u}}$. Se consideran tres alternativas para la realización de este paso:

1. Formulación original (Uhlmann, 2005).
2. Ciclos adicionales (Kempe and Fröhlich, 2012b).
3. Forzado multidirecto (Luo et al., 2007).

Formulación original

Consiste en la resolución de la ecuación de Helmholtz:

$$\nabla^2 \mathbf{u}^* - \frac{\mathbf{u}^*}{\alpha_k \nu \Delta t} = -\frac{1}{\nu \alpha_k} \left(\frac{\tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} + \mathbf{f}^k \right) + \nabla^2 \mathbf{u}^{k-1}. \quad (5.24)$$

Para su resolución, se opta por la utilización de un *solver elíptico* apropiado, la librería *Intel MKL 11.3*¹. Ésta resuelve la ecuación a partir del uso de transformadas discretas de Fourier.

Para su correcto uso, se invierte el signo de la ecuación (5.24) y se define:

¹Release 2016. Update 4.

$$Q = \frac{1}{\alpha_q \nu \Delta t} \quad (5.25)$$

y con esto, la ecuación en términos de operadores queda resumida a:

$$-\mathbb{L}(\mathbf{u}^*) + Q\mathbf{u}^* = \mathbb{H}(\mathbf{u}^*) = \frac{1}{\nu\alpha_q} \left(\frac{\tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} + \mathbf{f}^q \right) - \mathbb{L}(\mathbf{u}^{q-1}) \quad (5.26)$$

Aplicando el mismo procedimiento que en la ecuación (5.7a), se obtienen las siguientes fórmulas:

$$\begin{aligned} \mathbb{H}(u^*)_{ij} = & \frac{1}{\nu\alpha_q} \left(\frac{\tilde{u}_{ij}}{\Delta t} + f_{x,ij}^q \right) \\ & - \frac{u_{(i-1)j}^{q-1} + u_{i(j-1)}^{q-1} - 4u_{ij}^{q-1} + u_{(i+1)j}^{q-1} + u_{i(j+1)}^{q-1}}{h^2} \end{aligned} \quad (5.27a)$$

$$\begin{aligned} \mathbb{H}(v^*)_{ij} = & \frac{1}{\nu\alpha_q} \left(\frac{\tilde{v}_{ij}}{\Delta t} + f_{y,ij}^q \right) \\ & - \frac{v_{(i-1)j}^{q-1} + v_{i(j-1)}^{q-1} - 4v_{ij}^{q-1} + v_{(i+1)j}^{q-1} + v_{i(j+1)}^{q-1}}{h^2} \end{aligned} \quad (5.27b)$$

Adicionalmente a las discretizaciones anteriores, para la resolución bidimensional se debe aplicar un paso adicional de interpolación, para adecuar a las variables desplazadas a una malla convencional como lo exige la librería *MKL*.

La figura (5.6) muestra la disposición de las variables originales y su interpolación, aplicados en este caso a la componente u . La malla interpolada, simbolizada con círculos de color rojo, presenta la ventaja de calzar directamente con los contornos del dominio y con ello es posible resolver las ecuaciones con las librerías disponibles. Simbolizando como $u_{ij}^{(h)}$ a la variable interpolada y como u_{ij} —sin añadiduras—, las transformaciones se realizan de manera lineal, entendiéndose ésto como:

$$T_1 : u_{ij}^{(h)} = \frac{u_{ij} + u_{i(j+1)}}{2} \quad (5.28a)$$

$$T_2 : u_{ij} = \frac{u_{i(j-1)}^{(h)} + u_{ij}^{(h)}}{2} \quad (5.28b)$$

donde T_1 y T_2 son transformaciones lineales que permiten «trasladar» las variables entre las mallas. Cabe destacar que un procedimiento análogo se aplica para componente v y otras variables relevantes como \mathbf{f} .

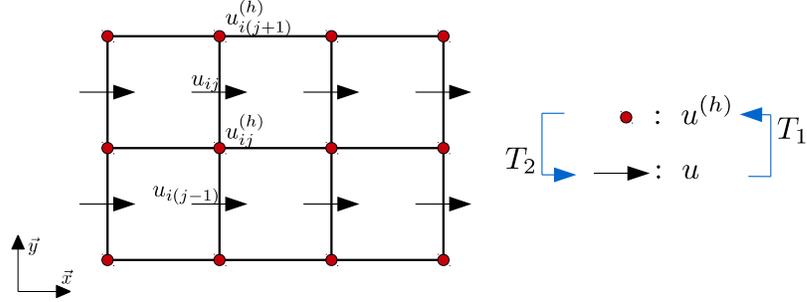


Figura 5.6: Transformación utilizada para el traspaso de información en la resolución de el «step e».

Ciclos adicionales de forzado (Kempe and Fröhlich, 2012b))

Consiste en una extensión a la formulación de Uhlmann (2005) donde, tras la obtención del campo \mathbf{u}^* , se agrega una serie de ciclos adicionales que se asemejan a los «step b, c y d» de acuerdo al siguiente esquema:

1. Obtención del campo preliminar \mathbf{u}^* (ecuación (5.24))
2. $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{(0)}$
3. Ciclos adicionales de forzado

DO $a = 1, N_c$

 - (a) Interpolación: $\bar{\mathbf{U}}(\mathbf{X}_l) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \mathbf{u}_{ij}^{(a-1)} \delta^{(2d)}(\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{X}_l) h^2$
 - (b) Forzado: $\mathbf{F} = (\mathbf{U}^{(d)} - \bar{\mathbf{U}}) / \Delta t$
 - (c) Esparcido: $\mathbf{f}_{ij} = \sum_{l=1}^{N_L} \mathbf{F}(\mathbf{X}_l) \delta^{(2d)}(\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{X}_l) \Delta V_l$,
 - (d) Corrección: $\mathbf{u}^{(a)} = \mathbf{u}^{(a-1)} + \Delta t \mathbf{f}$

END DO
4. $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{(N_c)}$,

continuando el algoritmo convencional de Uhlmann, es decir, procediendo a los pasos de corrección por presión. El término N_c corresponde al número de ciclos que se habrán de realizar, donde $N_l = 3$ es sugerido por los autores que proponen esta intervención.

Cabe destacar que estos ciclos adicionales intervienen con el término de forzado lagrangiano \mathbf{F} que es posteriormente utilizado para la integración temporal del movimiento de la partícula. Se ha optado por sumar todas las contribuciones adicionales que surgen de cada paso adicional para que, al momento de integrar el movimiento de las partículas, éste sea evaluado a partir de todo el forzado que se realizó sobre el fluido.

Forzado directo (Luo et al. (2007))

La idea original fue propuesta por Luo et al. (2007) y fue retomada posteriormente por Breugem (2012). Acá se evita la resolución de las ecuaciones de Helmholtz y se opta por una aplicación directa del término de forzado euleriano, \mathbf{f} , de modo que:

1. Obtención del forzado euleriano \mathbf{f} («step d»)
2. Forzado inicial: $\mathbf{u}^* = \tilde{\mathbf{u}} + \Delta t \mathbf{f}$
3. $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{(0)}$
4. Ciclos de forzado directo
 - DO a = 1, N_c
 - (a) Interpolación: $\bar{\mathbf{U}}(\mathbf{X}_l) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \mathbf{u}_{ij}^{(a-1)} \delta^{(2d)}(\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{X}_l) h^2$
 - (b) Forzado: $\mathbf{F} = (\mathbf{U}^{(d)} - \bar{\mathbf{U}}) / \Delta t$
 - (c) Esparcido: $\mathbf{f}_{ij} = \sum_{l=1}^{N_L} \mathbf{F}(\mathbf{X}_l) \delta^{(2d)}(\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{X}_l) \Delta V_l$,
 - (d) Corrección: $\mathbf{u}^{(a)} = \mathbf{u}^{(a-1)} + \Delta t \mathbf{f}$
 - END DO
5. $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{(N_c)}$.

Se enfatiza que los ciclos adicionales de Kempe y Fröhlich y los de Luo son idénticos en estructura, la diferencia se encuentra en el punto inicial donde los primeros resuelven la ecuación de Helmholtz y los segundos no. Debido a ello es que la formulación de Luo es mucho más efectiva en rapidez de cálculo que las alternativas y además es más sencilla de programar pues que consiste en simples sumas entre campos vectoriales. Un análisis respecto a los tiempos de cálculo dentro del código implementado puede hallarse en los cuadros (B.1) y (B.2).

5.3.4. Pasos de corrección por presión: «step f» al «step h».

Sea cual sea la decisión para resolver el denominado «step e», el campo de velocidades resultante es un campo no-solenoidal \mathbf{u}^* . Las posteriores

ecuaciones que restan se encargan de corregir esto. El «*step f*» determina un campo escalar ϕ denominado «*pseudo-presión*» que no tiene un significado físico explícito y que se obtiene de la siguiente forma:

$$\nabla^2 \phi^q = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{2\alpha_q \Delta t}. \quad (5.29)$$

La ecuación (5.29) para la «*pseudo-presión*» es resuelta utilizando el *solver de Poisson* FISHPACK90² debido a que está formulado especialmente para variables centradas en el volumen de control. En términos del operador laplaciano, (5.29) puede ser reescrita como:

$$\mathbb{L}(\phi^q) = \frac{1}{2\alpha_q \Delta t} \left(\frac{\partial u^*}{\partial x} + \frac{\partial v^*}{\partial y} \right), \quad (5.30)$$

la cual discretizada mediante diferencias finitas centradas toma la siguiente forma:

$$\mathbb{L}(\phi^q)_{ij} = \frac{1}{2\alpha_q \Delta t} \left(\frac{u_{(i+1)j}^* - u_{ij}^* + v_{i(j+1)}^* - v_{ij}^*}{h} \right). \quad (5.31)$$

Habiendo obtenido el campo escalar ϕ , sólo resta actualizar los valores del campo de velocidades y de presión. La ecuación para la velocidad (5.32) consiste en:

$$\mathbf{u}^q = \mathbf{u}^* - 2\alpha_q \Delta t \nabla \phi^q, \quad (5.32)$$

la cual, tras ser discretizada resulta en las siguientes fórmulas:

$$u_{ij}^q = u_{ij}^* - 2\alpha_q \Delta t \frac{\phi_{ij}^q - \phi_{(i-1)j}^q}{h}, \quad (5.33)$$

$$v_{ij}^q = v_{ij}^* - 2\alpha_q \Delta t \frac{\phi_{ij}^q - \phi_{i(j-1)}^q}{h}. \quad (5.34)$$

Finalmente la última ecuación del *solver de fluido*, expresada en términos de operadores es:

$$p^q = p^{q-1} + \phi^q - \alpha_q \Delta t \nu \nabla^2 \phi^q. \quad (5.35)$$

Para la cual se acude nuevamente a la misma discretización del término lagrangiano, resultando en:

²FISHPACK90, Copyright (C) 2004-2011, Computational Information Systems Laboratory, University Corporation for Atmospheric Research.

$$p_{ij}^q = p_{ij}^{q-1} + \phi_{ij}^q - \alpha_q \Delta t \nu \left(\frac{\phi_{(i-1)j}^q + \phi_{i(j-1)}^q - 4\phi_{ij}^q + \phi_{(i+1)j}^q + \phi_{i(j+1)}^q}{h^2} \right) \quad (5.36)$$

5.3.5. Integración temporal del movimiento de la partícula y modelo de colisiones.

Para modelar las colisiones entre partículas se ha utilizado la estrategia presentada por Costa et al. (2015) que consiste en una variación dentro de los modelos de esferas suaves descritos en el capítulo anterior.

Una característica importante es que «estira» el tiempo de colisión entre las partículas para hacer un uso adecuado de los recursos computacionales en cuanto al tiempo asociado a una colisión entre esferas elásticas suele ser notablemente menor a los tiempos utilizados para calcular a la fase de fluido (Kempe and Fröhlich (2012a)). Adicionalmente, el movimiento de las partículas es integrado mediante una estrategia denominada «*substepping*» que consiste en realizar múltiples cálculos asociados a la partícula dentro de un ciclo de cálculo del fluido.

Las fuerzas experimentadas dentro del proceso de colisión son divididas en sus componentes *normales* y *tangenciales* (respecto a la dirección del movimiento de las partículas, a ser detallado más adelante). Luego, se distinguen dos regímenes diferentes: el primero consistente en una etapa de *lubricación* –donde la fuerza hidrodinámica es modelada de acuerdo a una ley de arrastre– y el segundo correspondiente a una etapa de *contacto directo*, donde existe un traslape entre los cuerpos y en función de ello se determina una fuerza que resiste al movimiento.

Se considerará a \mathbf{u}_i como a la velocidad traslacional de la partícula i en algún instante de tiempo, en contraste a los campos de velocidades eulerianos con los que se trabajó anteriormente. Considérense entonces dos partículas i y j circulares de radio R_i y R_j y situadas en \mathbf{x}_i y \mathbf{x}_j respectivamente. La velocidad relativa entre éstas en el punto de contacto será:

$$\mathbf{u}_{ij} = (\mathbf{u}_i + R_i \omega_i \times \mathbf{n}_{ij}) - (\mathbf{u}_j + R_j \omega_j \times \mathbf{n}_{ji}), \quad (5.37)$$

donde ω_i es la velocidad angular de la partícula i y \mathbf{n}_{ij} es el vector normal unitario definido entre los centros de las partículas de modo que:

$$\mathbf{n}_{ij} = \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|}. \quad (5.38)$$

La fuerza de colisión dependerá de la distancia $\boldsymbol{\delta}_{ij,n}$ que separa a ambas partículas y de la componente normal de la velocidad relativa entre ambas, $\mathbf{u}_{ij,n}$, definidas como:

$$\boldsymbol{\delta}_{ij,n} = (R_i + R_j - \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|)\mathbf{n}_{ij}. \quad (5.39)$$

$$\mathbf{u}_{ij,n} = (\mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij})\mathbf{n}_{ij}. \quad (5.40)$$

Se define al régimen de lubricación como aquél donde la distancia entre las partículas se encuentra dentro del rango $0 < \|\boldsymbol{\delta}_{ij,n}\| \leq \delta_{min}$, donde δ_{min} es un parámetro definido por el usuario. Se opta por $\delta_{min} = 3h$ siguiendo las pautas de Kempe and Fröhlich (2012a). En su estructura, la función para la modelación del arrastre es semejante a su análoga para partículas esféricas –ec. (3.22)– habiendo reemplazado el coeficiente entero por aquél de la ecuación (3.24) y omitiendo el denominador, esto es:

$$\mathbf{F}_{lub} = \begin{cases} 0, & \|\boldsymbol{\delta}_{ij,n}\| > 3h \\ -\frac{4\pi\nu_f\rho_f R_e^2}{\|\boldsymbol{\delta}_{ij,n}\| + \Delta_l}\mathbf{u}_{ij,n}, & 0 < \|\boldsymbol{\delta}_{ij,n}\| \leq 3h \end{cases} \quad (5.41)$$

donde $R_e = (R_i^{-1} + R_j^{-1})^{-1}$ es el radio equivalente de las partículas i y j y Δ_l es una constante positiva que evita la indeterminación del denominador cuando la distancia entre las partículas tiende a cero. Se ha utilizado un $\Delta = 0.01h$ donde h es el paso espacial entre nodos consecutivos de la malla euleriana del fluido.

Se reconoce que la estructura de la fuerza de lubricación puede parecer arbitraria, no obstante, vale decir que no existe una formulación obtenida a través de un riguroso desarrollo físico-matemático –como si se da en el caso de esferas– y que en la literatura comúnmente se utilizan potenciales repulsivos y artefactos similares (ver Usman (2013) para un análisis entre distintos modelos).

Esto se puede deber también a que el caso de colisiones binarias presenta inesperadas dificultades (paradoja de Stokes, Lagrée (2015)) y que al ser un caso bidimensional cuyo símil tridimensional son “cilindros infinitos”, no tiene mucho sentido validar los resultados de manera experimental. Se ha imitado el formato de Kempe and Fröhlich (2012a) en la estructura de la función utilizada y se han despreciado los efectos de componentes tangenciales de lubricación, debido la contribución de aquella componente es mínima en comparación con la normal según lo referido en la publicación anteriormente mencionada.

Por otra parte, el modelo de colisión a utilizar es aquél propuesto por Costa et al. (2015) que se integra junto a un método iterativo para la integración de la posición de las partículas. Tanto para la dirección normal como para la tangencial consta de un modelo lineal de resorte y amortiguador. Así, para la primera de estas componentes:

$$\mathbf{F}_{ij,n} = -k_n \boldsymbol{\delta}_{ij,n} - \eta_n \mathbf{u}_{ij,n} \quad (5.42)$$

Se puede demostrar que el tiempo característico usado en una colisión entre partículas rígidas (según el modelo Hertziano de contacto) es inferior a aquél utilizado para resolver el fluido, de modo que la colisión en sí ocurre como un proceso casi instantáneo desde el punto de vista del fluido. En el presente modelo se opta por “estirar” el tiempo de la colisión $t_c = N_{col} \Delta t$ para poder capturar el proceso de deformación y poder integrar de forma más fina el efecto del contacto entre las partículas. En lo anterior, $N_{col} = 4$ es un parámetro del modelo que define en cuantos pasos de tiempo del fluido se resolverá la colisión. Las constantes la ecuación (5.42) están definidas como:

$$k_n = \frac{m_e (\pi^2 + \ln^2 e_{n,d})}{t_c^2}, \quad (5.43a)$$

$$\eta_n = -\frac{2m_e \ln e_{n,d}}{t_c}, \quad (5.43b)$$

donde $m_e = (m_i^{-1} + m_j^{-1})^{-1}$ es la masa equivalente del sistema de partículas. Por otra parte, la componente tangencial de la fuerza de contacto está definida de forma similar, pero sujeta a una saturación de acuerdo a la ley de Coulomb-Amagat que establece un límite para ésta proporcional al roce de la superficie. Esto es:

$$\mathbf{F}_{ij,t} = \min(|-k_t \boldsymbol{\delta}_{ij,t} - \eta_t \mathbf{u}_{ij,t}|, -\mu_s |\mathbf{F}_{ij,n}|) \mathbf{t}_{ij}, \quad (5.44)$$

para las constantes k_t y η_t que están definidas como:

$$k_t = \frac{m_{e,t} (\pi^2 + \ln^2 e_{t,s})}{t_c^2}, \quad (5.45a)$$

$$\eta_t = -\frac{2m_{e,t} \ln e_{t,s}}{t_c}, \quad (5.45b)$$

donde $m_{e,t} = (1 + 1/K^2)^{-1} m_e$ es la masa equivalente del sistema tangencial y $e_{t,s}$ es el coeficiente de restitución tangencial seco. A diferencia del caso

normal, donde el desplazamiento se obtiene explícitamente a partir de la integración temporal del movimiento de la partícula, la componente tangencial de éste se obtiene mediante:

$$\boldsymbol{\delta}_{ij,t}^{(*)n+1} = \underline{\mathbf{R}} \cdot \boldsymbol{\delta}_{ij,t}^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{u}_{ij,t} dt \quad (5.46)$$

$$\boldsymbol{\delta}_{ij,t}^{n+1} = \begin{cases} \boldsymbol{\delta}_{ij,t}^{(*)n+1}, & \|\mathbf{F}_{ij,t}\| \leq \mu_s \|\mathbf{F}_{ij,n}\|, \\ (1/k_t)(-\mu_c)\mathbf{t}_{ij} - \eta_t \mathbf{u}_{ij,t}, & \|\mathbf{F}_{ij,t}\| \geq \mu_s \|\mathbf{F}_{ij,n}\| \end{cases} \quad (5.47)$$

Donde $\boldsymbol{\delta}_{ij,t}^{(*)n+1}$ es un desplazamiento preliminar que debe ser corregido en el caso de una saturación de la fuerza de contacto tangencial (5.47). La matriz $\underline{\mathbf{R}}$ se encarga de rotar el vector desplazamiento entre los diferentes pasos de tiempo, ya que el sistema de referencia es local y cambia continuamente.

De este modo, la fuerza y el torque netos asociados al contacto del par de partículas ij se establece como:

$$\mathbf{F}_{ij}^c = \mathbf{F}_{ij,n} + \mathbf{F}_{ij,t} \quad (5.48a)$$

$$\mathbf{T}_{ij}^c = R_p(\mathbf{n}_{ij} \times \mathbf{F}_{ij,t}) \quad (5.48b)$$

donde R_p será el radio para la partícula i o j según corresponda. La contribución total proveniente de los modelos de contacto y lubricación por parte de todas las partículas será:

$$\mathbf{F}_i^c = \sum_{j=1, i \neq j}^{N_p} \mathbf{F}_{ij}^c \quad (5.49a)$$

$$\mathbf{T}_i^c = \sum_{j=1, i \neq j}^{N_p} \mathbf{T}_{ij}^c \quad (5.49b)$$

Se destaca adicionalmente que para el cálculo de colisiones respecto a muros se consideran las mismas ecuaciones expuestas anteriormente, considerando $R \rightarrow \infty$, $m \rightarrow \infty$ y las propiedades mecánicas del material que se le asigne a dicha superficie.

Habiendo establecido lo anterior, el cálculo de las fuerzas de lubricación y de contacto se lleva a cabo dentro de un ciclo iterativo consistente en:

1. Inicio del ciclo temporal que integra el movimiento de las partículas «*substep*».
 - DO $q = 1, N_s$
2. Inicio del ciclo iterativo en torno a la posición de las partículas.
 - DO $k = 1, N_{lim}$
3. \forall partícula j en contacto con la partícula i .
 - (a) Calcular $\delta_{ij,n}^{q,k}$ y $\delta_{ij,t}^{q,k} = \underline{\mathbf{R}} \cdot \delta_{ij,t}^{q-1,k} + \frac{\alpha_q \Delta t^s}{2} (\mathbf{u}_{ij,t}^{q,k} + \underline{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{u}_{ij,t}^{q-1})$.
 - (b) Calcular $\mathbf{F}_{ij,n}^{q,k}$ y $\mathbf{F}_{ij,t}^{q,k}$.
 - (c) Actualizar $\mathbf{F}_c^{q,k}$ y $\mathbf{T}_c^{q,k}$.
4. Determinación de la velocidad traslacional y angular para el k -ésimo ciclo iterativo.

$$\mathbf{u}_c^{q,k} = \mathbf{u}_c^{q-1} + \mathcal{V} + \frac{\alpha_q \Delta t^s}{2} \frac{\mathbf{F}_c^{q,k} + \mathbf{F}_c^{q-1}}{\rho_p V_p} \quad (5.50)$$

$$\boldsymbol{\omega}_{q,k} = \boldsymbol{\omega}_{q-1,k} + \mathcal{W} + \frac{\alpha_q \Delta t^s}{2} \frac{\mathbf{T}_c^{q,k} + \mathbf{T}_c^{q-1}}{\rho_p I_p} \quad (5.51)$$

5. Actualización de la posición dentro del k -ésimo ciclo iterativo.

$$\mathbf{x}_c^{q,k} = \mathbf{x}_c^{q-1,k} + \frac{\alpha_q \Delta t^s}{2} (\mathbf{u}_c^{q,k} + \mathbf{u}_c^{q-1}) \quad (5.52)$$

6. Si ($k \geq 2$): Determinación del error \mathcal{E} entre iteraciones consecutivas.

$$\mathcal{E}^k = \|\mathbf{x}_c^{q,k} - \mathbf{x}_c^{q,k-1}\| \quad (5.53)$$

7. Si ($\mathcal{E}^k \leq \mathcal{T}$): Fin del ciclo iterativo.
 - $q = q + 1$.
8. Continuar ciclos temporales hasta alcanzar $q = N_s$ donde se recalculará el fluido para reiniciar posteriormente la integración temporal del movimiento de la partícula.

Los términos \mathcal{V} y \mathcal{W} que aparecen en las ecuaciones (5.50) y (5.51) respectivamente, corresponden a los términos de acoplamiento entre sólidos y fluidos que aparecen en las ecuaciones (4.12) y (4.14). Se debe notar que dentro de un *timestep* de fluidos se realizan múltiples cálculos del movimiento de la partícula en un procedimiento denominado «*substepping*» y que sigue al contador q en la secuencia recién expuesta. La cantidad de subdivisiones a realizar está cuantificada en el entero N_s que limita a dicho ciclo y que define al paso temporal del *substep* $\Delta t^s = \Delta t/N_s$. Por otra parte, N_{lim} es el máximo de ciclos iterativos que se admitirán antes de abortar el cálculo si es que no se alcanza convergencia y $\mathcal{T} = 10^{-5}h$ es la tolerancia admitida para dicho ciclo.

5.4. Casos de validación.

Para evaluar el desempeño del código se ha trabajado un grupo de casos que permiten verificar el comportamiento del programa en distintos casos considerados como patrones de referencia.

5.4.1. Flujo de Poiseuille

Se utiliza un dominio rectangular $\Omega = [L_x \times L_y]$ discretizado en N_x y N_y elementos respectivamente. En las paredes laterales se disponen condiciones de entrada-salida, esto es, en la entrada se dispone un perfil uniforme U_∞ y en la otra pared se aplica una condición de salida convectiva:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + U_\infty \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} = 0. \quad (5.54)$$

La cual discretizada para la dirección x resulta en:

$$\begin{aligned} u_{N_x+1,j}^q &= u_{N_x+1,j}^{q-1} - \gamma_q \frac{\Delta t}{h} U_\infty (u_{N_x+1,j}^{q-1} - u_{N_x+1,j-1}^{q-1}) \\ &\quad - \zeta_q \frac{\Delta t}{h} U_\infty (u_{N_x+1,j}^{q-2} - u_{N_x+1,j-1}^{q-2}). \end{aligned} \quad (5.55)$$

En las fronteras superior e inferior se impone la condición de no deslizamiento, la figura (5.7) muestra el arreglo que se realiza en pos de imponer la condición de no-deslizamiento sobre las componentes u de velocidad que están alineadas con la dirección del flujo.

El objetivo de esta simulación consiste en observar un correcto desarrollo del perfil de velocidades, del gradiente de presión y asegurar la conservación de la masa.

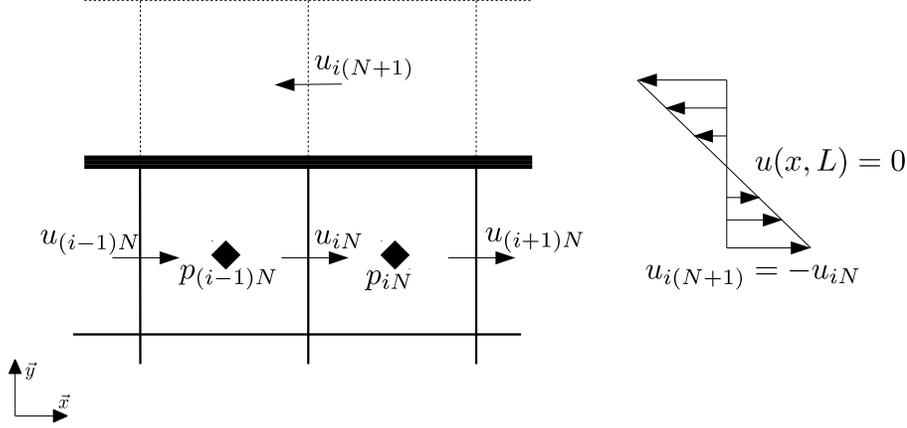


Figura 5.7: Imposición de la condición de no-deslizamiento para la variable u cuyos nodos extremos no calzan con el contorno donde se prescribe la condición de no-deslizamiento.

En particular, se utilizan los parámetros $N_x = 2048$ y $N_y = 128$ para un $L_x = 10$. De este modo, $L_y = 0.625$ y $L_x/L_y = 16$. Para el perfil de entrada se elige un perfil uniforme $U_\infty = \nu Re/L_y$ donde $\nu = 0.01$ y $Re = 100$ y 1000 para asegurar un comportamiento apropiado del código en distintas condiciones de flujo. Los perfiles de velocidades son adimensionalizados respecto a la velocidad de entrada U_∞ .

El perfil de velocidades teórico que se ha de obtener consiste en:

$$u(r) = U_{\max} \left(1 - \left(\frac{2r}{L_y} \right)^2 \right), \quad (5.56)$$

donde $r = y - L_y/2$ es una coordenada local y $R = L_y/2$. Por consideraciones de conservación de la masa, $U_{\max} = 1.5U_\infty$ y, por lo tanto:

$$\frac{u(r)}{U_\infty} = 1.5 \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right). \quad (5.57)$$

Se destaca que una vez que el flujo se ha desarrollado completamente se mantiene constante a lo largo del resto del dominio aguas abajo y del tiempo. El perfil de velocidades obtenido a través de las simulaciones es comparado con el perfil teórico en la figura (5.8) donde se observa que es ligeramente menor en magnitud hacia el centro del eje y .

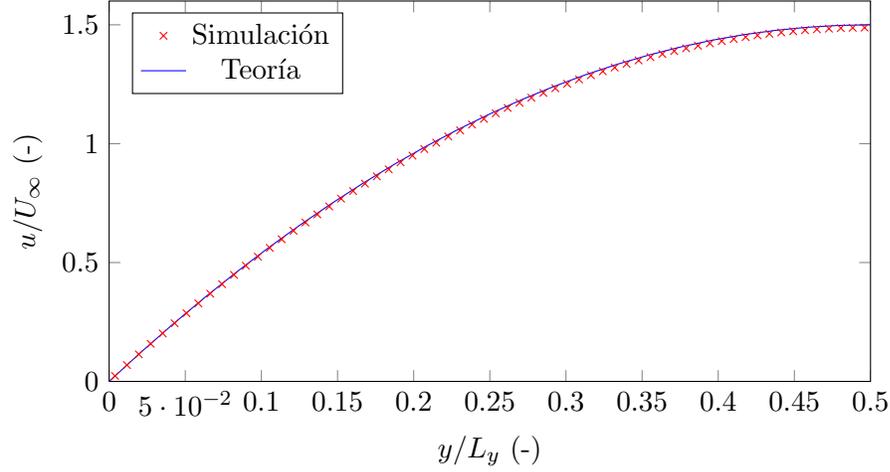


Figura 5.8: Perfil de velocidades desarrollado en la simulación comparado con el perfil de velocidades teórico de la ecuación (5.57).

La velocidad máxima alcanzada en el perfil de velocidades desarrollado es de $u/U_\infty = 1.4882$ en la posición $y/L_y = 0.4961$ con un error asociado del 0.79 %, de acuerdo al valor teórico según la ecuación (5.57).

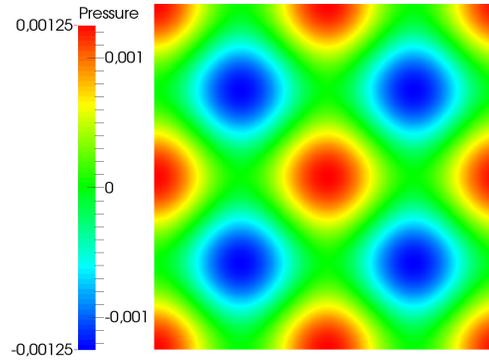
Adicionalmente, la masa que atraviesa una sección longitudinal del dominio por unidad de profundidad será $m = \int_{-R}^R u(r) dr$, es decir, $m = L_y U_\infty$ si se analiza el origen del dominio. Para el flujo completamente desarrollado se determina un valor de $m = 0.6198 U_\infty$ en un dominio reducido de largo 0.6201 (debido a la herramienta utilizada para el cálculo, *Paraview*). El error relativo asociado a ello es del 0.06 %.

5.4.2. Vórtices de Taylor-Green

El caso de los vórtices de Taylor-Green es un caso elemental para validación en dos dimensiones bajo condiciones de contorno periódicas. Consiste en un campo de velocidades y de presión los cuales satisfacen las ecuaciones bidimensionales de Navier-Stokes, prescritos tal que:

$$u(x, y, t) = \sin(k_x x) \cos(k_y y) \exp^{-(k_x^2 + k_y^2) \nu t} \quad (5.58)$$

$$v(x, y, t) = -\frac{k_x}{k_y} \sin(k_y y) \cos(k_x x) \exp^{-(k_x^2 + k_y^2) \nu t} \quad (5.59)$$



(a) Campo de presión.

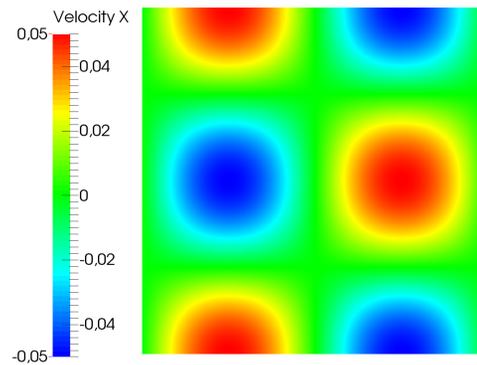
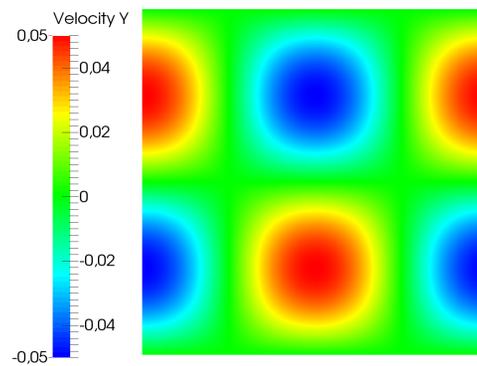
(b) Campo de velocidad u .(c) Campo de velocidad v .

Figura 5.9: Condiciones iniciales del campo de velocidad y de presión en el caso de los vórtices de Taylor-Green. Caso ilustrado consiste en aquel de $N = 1536$ elementos.

$$p(x, y, t) = \frac{1}{2} \left(\cos^2(k_y y) \frac{k_x^2}{k_y^2} - \sin^2(k_x x) \right) \exp^{-2(k_x^2 + k_y^2)\nu t} \quad (5.60)$$

donde $k_x = k_y = \pi$. El uso de este dominio permite validar el funcionamiento del *solver de fluido* en su avance temporal y su comportamiento espacial. La comparación de dos puntos en el tiempo bajo diferentes mallas permite ver la capacidad del solver realizado de resolver el flujo apropiadamente.

Se utiliza un dominio de dimensiones $\Omega = [0, 2] \times [0, 2]$ donde se inician los campos de velocidad y presión de acuerdo a las tres ecuaciones anteriores. El paso de tiempo utilizado es de $\Delta t = 10^{-4}$ y $\nu = 0.01$. Se realizan simulaciones para mallas de $N = 256, 512, 1024$ y 1536 elementos en ambas direcciones cuyos resultados se comparan en la figura (5.10); en ella se toma un punto referencial en la malla de fluido y se procede a comparar su evolución en el tiempo con aquella prescrita teóricamente.

Para los primeros 1000 timesteps de simulación, el error en la simulación de $N = 256$ alcanza un aproximadamente un 0.0001%. Se verifica un error que disminuye progresivamente mientras en mayor detalle se resuelva el dominio, propio de los esquemas de diferencias finitas. Además, se evidencia que el error incrementa de forma lineal a lo largo del tiempo para cualquiera de las mallas estudiadas.

5.4.3. Cilindro estacionario

Se sitúa un cilindro de diámetro D centrado en $\mathbf{x}_c = (x_c, y_c)$ dentro de un dominio de dimensiones $[L_x \times L_y]$. La figura (5.11) presenta un diagrama que esquematiza la simulación. Las paredes inferiores y superiores cuentan con condiciones de contorno de simetría para la velocidad, en la entrada se asigna un perfil uniforme de velocidad U_∞ y en la salida se aplica una condición de salida convectiva al igual que en el caso de Poiseuille.

Para la presión se aplica una condición de contorno de Neumann homogénea (simetría) en cada una de las paredes. El objetivo de estas simulaciones reside en evaluar la capacidad del código de representar magnitudes propias de la interacción sólido-fluido y, a través de ello, se hace posible comparar las distintas formulaciones del método entre ellas y frente a otras referencias.

Se sensibiliza el número de Reynolds de partícula $Re_p = U_\infty D / \nu_f$, donde ν_f es la viscosidad cinemática del fluido, para estudiar el desprendimiento de vórtices –a través del número de Strouhal, St – y los coeficientes de arrastre

y sustentación, C_D y C_L respectivamente, definidos como:

$$C_D = \frac{F_x}{\frac{1}{2}\rho_f U_\infty^2 D}, \quad (5.61a)$$

$$C_L = \frac{F_y}{\frac{1}{2}\rho_f U_\infty^2 D}. \quad (5.61b)$$

Para determinar las fuerzas netas ejercidas sobre la partícula se ha optado por seguir el procedimiento de Uhlmann (2005) sumando el término de forzado lagrangiano en cada uno de los pasos de Runge-Kutta, de modo que es posible reescribir las ecuaciones (5.61a) y (5.61b) como:

$$C_D = \frac{\sum_{q=1}^3 \sum_{l=1}^{N_L} F_x^q(\mathbf{X}_l) \Delta V_l}{\frac{1}{2} U_\infty^2 D}, \quad (5.62a)$$

$$C_L = \frac{\sum_{q=1}^3 \sum_{l=1}^{N_L} F_y^q(\mathbf{X}_l) \Delta V_l}{\frac{1}{2} U_\infty^2 D}, \quad (5.62b)$$

Se establecen las simulaciones manteniendo constante los parámetros $D/h = 38.4$ y $\nu = 0.01$, quedando de este modo la velocidad definida como $U_\infty = \nu Re_P / D$. El dominio efectivo utilizado es de $\Omega = [0, 8] \times [0, 8]$

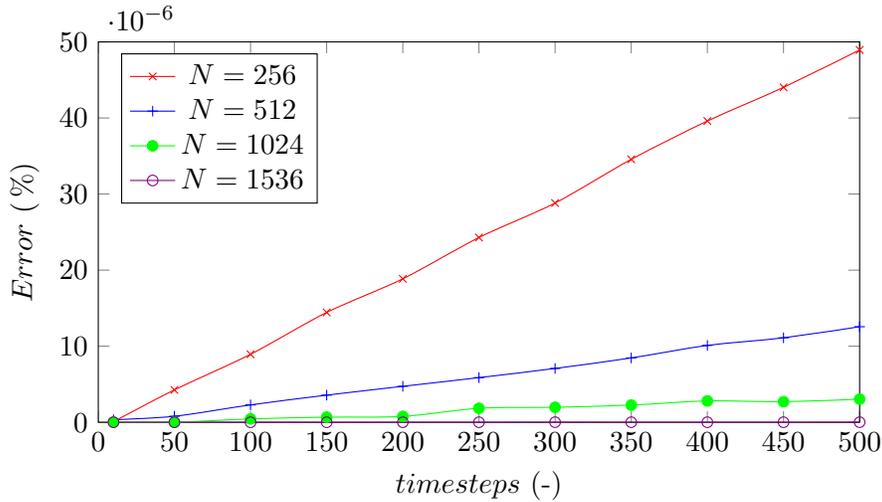


Figura 5.10: Error en el decaimiento del campo de velocidades para el caso de Taylor-Green. Evaluación a partir de la solución teórica y resultados de un nodo representativo.

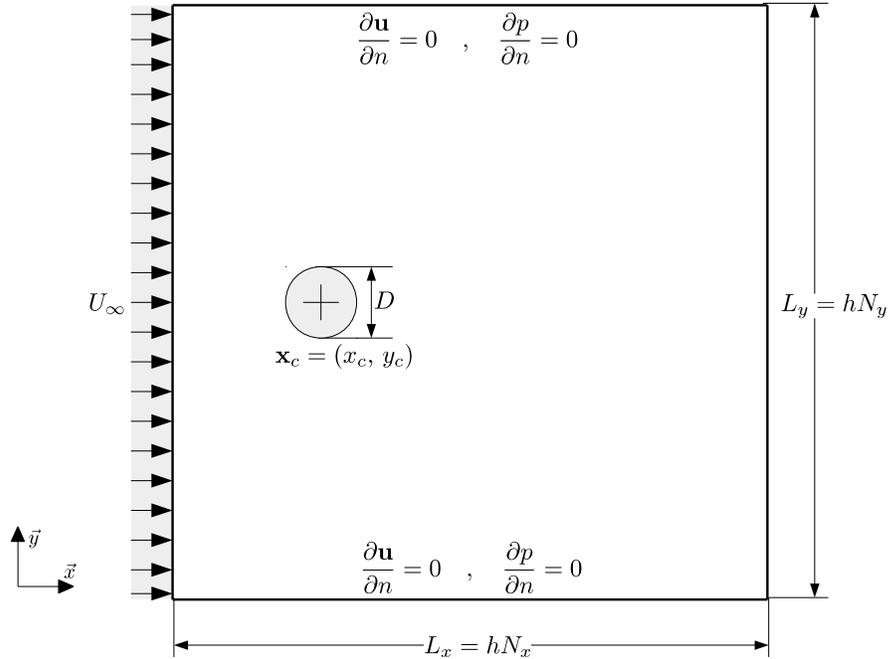


Figura 5.11: Disposición de las variables en la frontera donde se imponen las condiciones de periodicidad.

discretizando cada dimensión en $N_x = N_y = 1024$ elementos y se utiliza un timestep $\Delta t = 0.0005$. Dadas las condiciones establecidas y en el caso más crítico, para el flujo a $Re_P = 160$, el CFL de la simulación es de 0.62, por debajo del valor crítico de $\sqrt{3}$.

Las simulaciones llevan a cabo aguardando que la liberación de vórtices se establezca y torne periódica, esto es, cuando C_D y C_L oscilan entre valores constantes. Una vez alcanzado este comportamiento se toman 1.2×10^4 muestreos equiespaciados cada $10 \Delta t$ y se procede a determinar los valores medios y las fluctuaciones de los coeficientes estudiados, a los cuales también se les aplica un análisis de Fourier para determinar la frecuencia de su oscilación, por medio de la cual se determina el Sl del caso evaluado.

Los casos referenciales utilizados consisten por una parte en las simulaciones realizadas por Uhlmann (2004) y Uhlmann (2005), a fin de comparar el código del investigador con el realizado en el presente trabajo y de este modo evaluar cuan cercano es el programa realizado frente a la referencia

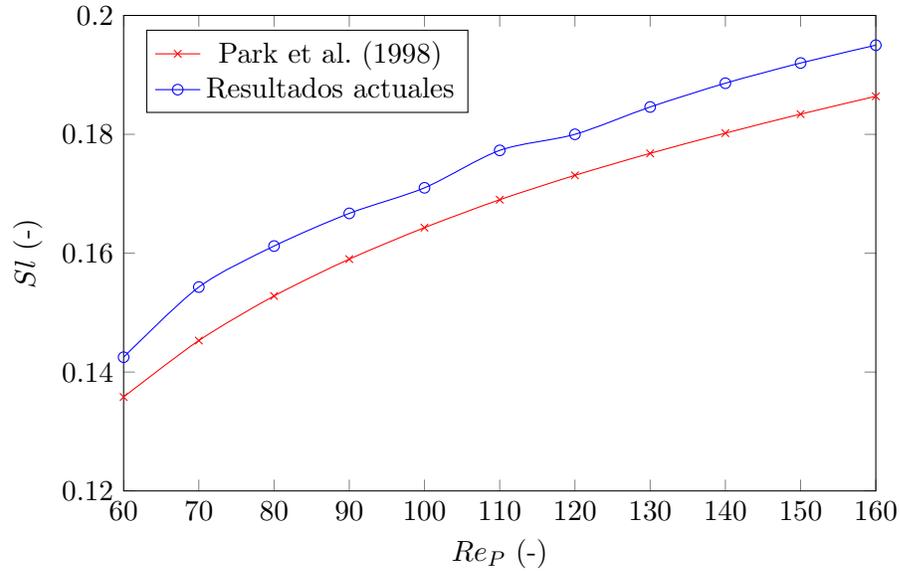
principal a partir de la cual se trabaja. Otro trabajo de interés es el de Park et al. (1998), quienes resuelven el flujo alrededor de la partícula por medio de esquema de paso fraccionado completamente implícito, resolviendo las derivadas temporales mediante el método de Crank-Nicolson y las derivadas espaciales mediante diferencias finitas centradas de segundo orden. El último corresponde al trabajo de Liu et al. (1998) quienes utilizan discretización mediante diferencias finitas centradas de segundo orden con términos de cuarto orden para disipación artificial y para la integración temporal utilizan un esquema de Runge-Kutta de quinto orden. Destaca que los dos últimos trabajos resuelven la capa límite alrededor del cuerpo sumergido a diferencia de los trabajos que se basan en el método de la frontera inmersa.

La figura (5.12a) muestra el comportamiento del número de Strouhal a distintos Re_P y su comparación con la referencia de Park et al. (1998). Se observa que las simulaciones sobrestiman los valores referenciales, lo que indicaría que la frecuencia de desprendimiento de vórtices es más rápida que en el trabajo comparado. Discrepancias de esta naturaleza no son sorprendentes teniendo en cuenta que la capa límite alrededor de la partícula no es resuelta y es resumida a una región ralentizada de fluido.

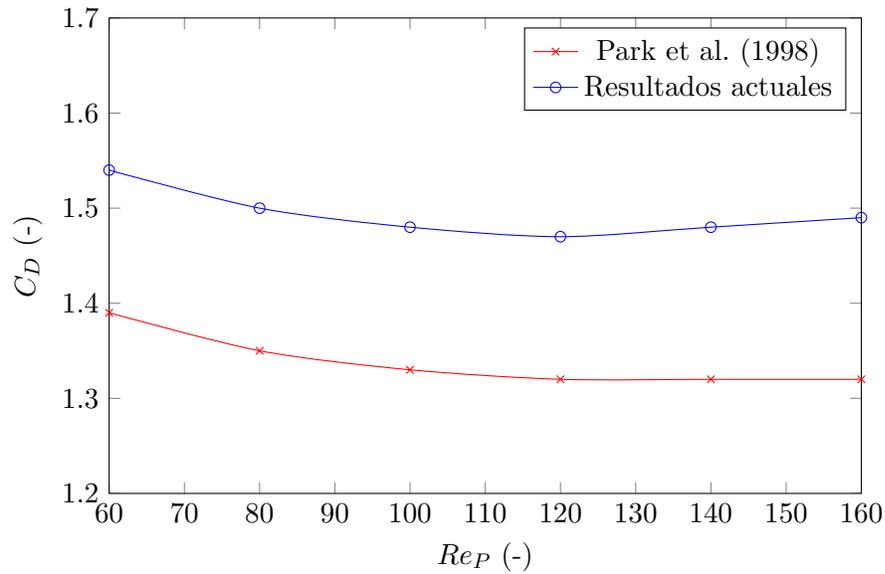
Las figuras (5.12b), (5.13a) y (5.13b) muestran comparaciones entre el arrastre medio \bar{C}_D y las fluctuaciones de los coeficientes de arrastre y de sustentación, \hat{C}_D y \hat{C}_L respectivamente. En estos se hallan notables diferencias que en el caso del \bar{C}_D superan el 25 % para la simulación que se halla en un $Re_P = 100$. Para todo Re_P existe una sobrestimación cada uno de los coeficientes estudiados, lo cual se produce a partir de la omisión de la capa límite, cuya resolución es reemplazada por un área de fluido ralentizada arbitrariamente, sin ninguna ley física de por medio. En general, las figuras anteriores muestran que todos los parámetros de arrastre y sustentación constantemente son sobrestimados y que esta diferencia incrementa en términos absolutos a medida que es número de Reynolds incrementa.

Otros casos de cilindros estacionarios son evaluados manteniendo ahora a $Re_P = 100$ constante y variando parámetros como la relación L/D o el número de elementos utilizados en la discretización N . Se mantienen constantes el tamaño del dominio y los valores de Δt y ν . Los resultados se presentan en el cuadro (5.1) y muestran que bajo las condiciones establecidas tanto el arrastre como la sustentación experimentados por la partícula son fuertemente sensibles ante ambos parámetros sensibilizados.

Respecto a la frecuencia del desprendimiento de vórtices, ésta es ligeramente mayor en los casos «gruesos» que en los casos «finos», mostrando un error relativo en los primeros del 4.8 % ($N = 512$) mientras que los segundos este disminuye a un 1.8 % ($N = 1536$), estando ambas magnitudes

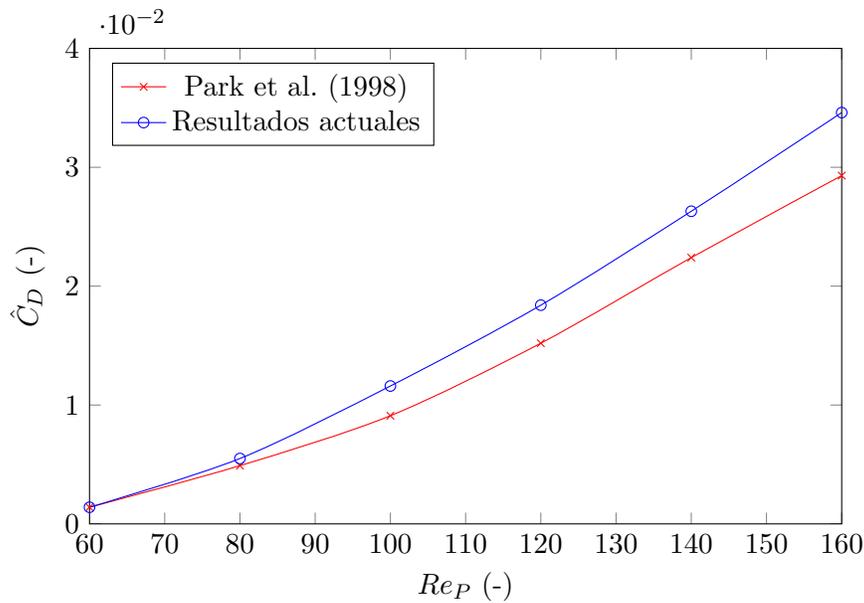


(a) Gráfico del error en el número de Strouhal Sl de la simulación en comparación con la referencia Park et al. (1998).

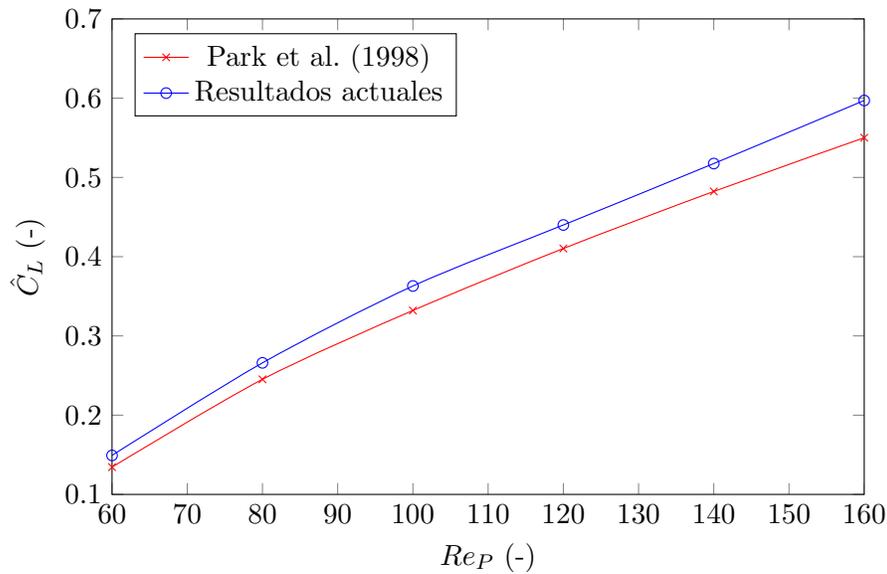


(b) Comparación entre las simulaciones realizadas con el código local y los valores referenciales de Park et al. (1998) para el valor medio del coeficiente de arrastre C_D .

Figura 5.12: Resultados de las simulaciones para cilindros estacionarios realizadas mediante la formulación de Uhlmann para la resolución del «step e».



(a) Comparación entre las simulaciones realizadas con el código local y los valores referenciales de Park et al. (1998) para la amplitud del coeficiente de arrastre \hat{C}_D .



(b) Comparación entre las simulaciones realizadas en el presente trabajo y los valores referenciales de Park et al. (1998) para la amplitud del coeficiente de sustentación \hat{C}_L .

Figura 5.13: Resultados de las simulaciones para cilindros estacionarios realizadas mediante la formulación de Uhlmann para la resolución del «step e».

determinadas respecto a los resultados «patrones» de Liu et al. (1998).

	N	D/h	\bar{C}_D	\hat{C}_D	\hat{C}_L	Sl
Actual [FU]	512	19.2	1.529	0.012	0.381	0.173
Actual [KF]	512	19.2	1.358	0.010	0.340	0.170
Actual [Luo]	512	19.2	1.536	0.012	0.381	0.173
Actual [FU]	1024	38.2	1.480	0.012	0.363	0.171
Actual [KF]	1024	38.2	1.354	0.010	0.344	0.172
Actual [Luo]	1024	38.2	1.454	0.012	0.367	0.172
Actual [FU]	1536	38.2	1.415	0.011	0.351	0.168
Uhlmann (2004)	512	19.2	1.516	0.011	0.345	0.169
Uhlmann (2005)	1024	38.2	1.501	0.011	0.349	0.172
Uhlmann (2005)	1536	38.2	1.453	0.011	0.339	0.169
Liu et al. (1998)	-	-	1.350	0.012	0.339	0.165

Cuadro 5.1: Comparación del valor medio del coeficiente de arrastre \bar{C}_D , las fluctuaciones del coeficiente de arrastre y de sustentación, \hat{C}_D y \hat{C}_L respectivamente, y número de Strouhal Sl para el caso del cilindro estacionario. Valores determinados para $Re_P = 100$. FU: «formulación de Uhlmann», KF: «Kempe and Fröhlich (2012a)» (KF), Luo: «Luo et al. (2007)», de acuerdo a las formulaciones para la resolución del «step e» anteriormente descritas.

Respecto a los coeficientes de arrastre y de sustentación, las simulaciones discretizadas a $N = 512$ elementos por dirección muestran importantes diferencias respecto al caso «patrón» de Liu et al., lo que ocurre tanto para las simulaciones de Uhlmann como para las desarrolladas en el presente documento. Dicha diferencia se reduce drásticamente al incrementar la relación L/D . Por ejemplo, para el caso resuelto en mayor detalle ($N = 1536$), la diferencia en el \bar{C}_D se reduce a un 4.8% frente a un 9.6% ($N = 1024$) y un 13.2% ($N = 512$).

De entre las formulaciones estudiadas destaca que la de Kempe y Fröhlich (KF), cuyo arrastre medio \bar{C}_D se encuentra sólo un 0.6% por sobre del valor referencial de Liu et al. en la malla más gruesa de $N = 512$, mucho más cerca que las otras dos formulaciones comparadas cuyos valores exceden a los referenciales por más de un 10%.

Este comportamiento se repite al examinar la variación del C_L , donde el 0.3% de error experimentado bajo los ciclos adicionales de Kempe y Fröhlich se imponen ante las otras dos formulaciones que nuevamente exceden el 10% de error relativo.

La poca precisión en los resultados proporcionados por Uhlmann y Liu en la variación del coeficiente de arrastre prohíben análisis detallados respecto a la exactitud de los distintos métodos en torno a dicho parámetro. Por otra parte, el número de Strouhal más cercano a la referencia fue obtenido utilizando la formulación de Uhlmann para $N = 1536$.

Se verifica que los pasos adicionales de Kempe y Fröhlich son un enorme aporte en la correcta aplicación de la condición de no-deslizamiento alrededor de una partícula estacionaria.

5.4.4. Cilindro oscilante

Se prescribe un movimiento periódico para el cilindro en dirección perpendicular al flujo base según la función:

$$y_c(t) = A \sin(2\pi f_f t), \quad (5.63)$$

con una amplitud $A = 0.2D$ y una frecuencia $f_f/f_n = 0.8$ donde f_n es la frecuencia natural de desprendimiento de vórtices. Los valores para las dimensiones del dominio y parámetros del fluido se mantienen idénticos a la simulación anterior. Se utiliza el $f_f = 0.52$ sugerido en la publicación de Uhlmann (2005) y se procede a tomar muestreos del C_D y del C_L una vez que la simulación ha traspasado su etapa transiente y se encuentra oscilando entre valores estables de los coeficientes referidos anteriormente. Los resultados obtenidos y su comparación respecto a los valores referenciales se encuentran en el cuadro (5.2).

Los valores determinados –expuestos en el cuadro (5.2)– muestran que la simulación realizada posee problemas en la representación de la capa límite mientras la partícula se desplaza. Nótese que el movimiento del cuerpo es prescrito mediante una función y no es producto de un esquema de integración temporal para el movimiento de la partícula. De este modo se prueba que existen diferencias mayores entre el código utilizado por Uhlmann (2005) y el presente.

Destaca que aplicando las intervenciones de Luo y las de Kempe y Fröhlich los valores comparados mejoran drásticamente respecto a la simulación canónica de Uhlmann. Se mantiene la tendencia del caso estacionario que bajo el planteamiento de KF se obtienen los valores de arrastre más cercanos a las referencias utilizadas, manteniendo el resto de las variables constantes.

Se debe notar que el valor cuadrático medio del coeficiente de sustentación $(C_L)_{\text{rms}}$ se encuentra ampliamente sobrestimado, donde la simulación

	\bar{C}_D	\hat{C}_D	$(C_L)_{\text{rms}}$
Actual [FU] Ω_1	1.520	0.060	0.485
Actual [KF] Ω_1	1.338	0.054	0.469
Actual [Luo] Ω_1	1.440	0.058	0.501
Uhlmann Ω_1	1.380	0.063	0.176
Uhlmann Ω_2	1.354	0.065	0.166
Uhlmann, δ_h de 4 puntos	1.402	0.064	0.172
Esquema de Kajishima y Takiguchi	1.282	0.088	0.223
Lu and Dalton (1996)	1.25	-	0.18

Cuadro 5.2: Comparación del valor medio del coeficiente de arrastre \bar{C}_D , la amplitud de sus fluctuaciones \hat{C}_D y el valor cuadrático medio del coeficiente de sustentación $(C_L)_{\text{rms}}$ para un cilindro oscilante bajo un $Re_P = 185$. Datos referenciales extraídos de Uhlmann (2005). Ω_1 y Ω_2 corresponden a los dominios discretizados en $N = 1024$ y $N = 1536$ elementos por dirección respectivamente, manteniendo constantes las dimensiones del dominio.

actual bajo la formulación de Uhlmann se halla con un error del 175% respecto a su símil en la publicación original. Este comportamiento se mantiene al resolver el problema utilizando las formulaciones alternativas de Luo y KF.

En vista de que el movimiento de la partícula ocurre en el eje y , esta situación es particularmente preocupante en cuanto muestra problemas en la representación de la frontera del sólido en su dirección de movimiento.

5.4.5. Sedimentación de una única partícula

Se deja caer una partícula en un dominio rectangular de dimensiones $\Omega = [0, 6] \times [0, 2]$, recreando las condiciones originales de Glowinski et al. (2001) que posteriormente fueron utilizados por Uhlmann (2004) para la validación de su método. El primer autor evalúa una metodología basada en la combinación de métodos de dominio ficticio basados multiplicadores de Lagrange en conjunto con una aproximación mediante elementos finitos para la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes.

Se establece $\nu = 0.01$, $D/h = 64$, $\rho_p/\rho_f = 1.5$, $N_x = 1536$, $N_y = 512$ y $\Delta t = 0.0001[s]$. Una diferencia con la publicación del Uhlmann es que éste declara ocupar $\mathbf{g} = (981, 0)$ mientras que en la simulación se utiliza $\mathbf{g} = (9.81, 0)$ pues se asume que lo primero es un error de escritura dado que la combinación original de parámetros acelera desmedidamente las partículas

utilizadas –desestabilizando la simulación inmediatamente– y porque resulta extraño que se haya utilizado a la gravedad en una base que sea diferente a aquella del SI.

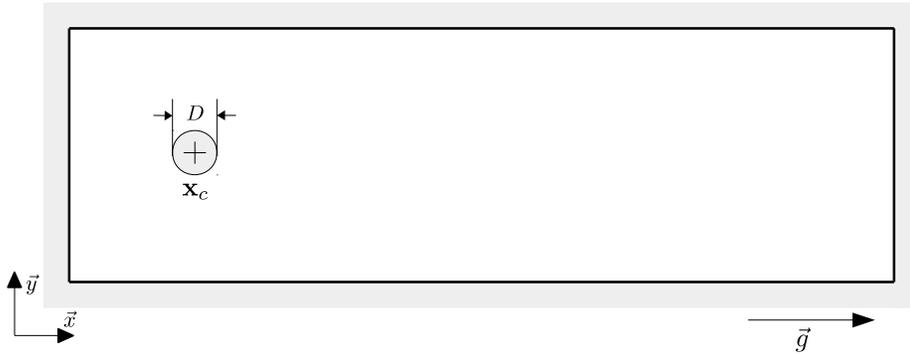


Figura 5.14: Disposición y nomenclatura para las partículas en el caso de la sedimentación.

Según lo reportado por Uhlmann (2004), la partícula alcanza una velocidad máxima cuantificada mediante un $Re_P \approx 330$. De acuerdo a Glowinski et al. (2001), la partícula alcanza valores de Re_P que se mueven entre 438.6 y 466 dependiendo del paso espacial utilizado.

Las presentes simulaciones se realizaron bajo las tres formulaciones para la resolución del «step e» de forma idéntica a los casos anteriores. La evolución de su número de Reynolds a lo largo del tiempo se puede observar en la figura (5.15). Los valores críticos obtenidos para el Re_P consisten en 95.6, 101.2 y 96.1 para los casos FU, KF y de Luo, respectivamente.

Lo que se observa es el efecto de la sobrestimación de los coeficientes de arrastre y sustentación, notable particularmente en el caso del cilindro oscilante. Al poseer mayor arrastre a lo largo de su movimiento entonces las aceleraciones que experimentarán los cuerpos serán menores y alcanzarán velocidades terminales reducidas como acá se ha puede ver.

5.5. Aplicaciones

5.5.1. Sedimentación de un par de partículas

En el mismo dominio anterior se disponen ahora dos partículas de diámetros $D^{(1)}/h = D^{(2)}/h = 64$, la primera ubicada en $\mathbf{x}_c^{(1)} = (1, 1.0001)$ y la

segunda en $\mathbf{x}_c^{(2)} = (1.5, 0.9999)$, además $\rho_p^{(1)} = \rho_p^{(2)} = 1.5\rho_f$. Para la simulación se utiliza un $\Delta t = 0.0005$.

De acuerdo a Prosperetti and Tryggvason (2009), al soltar las partículas, éstas deberían comenzar a descender debido a efectos gravitacionales. La que se encuentra más adelante desprende una estela al desplazarse que reduce el arrastre experimentado por aquella que se encuentra más atrás, permitiendo la última acelere y alcance a la primera (*drafting*) y –si el St de las par de partículas lo permite– la posibilidad de contacto entre ambos cuerpos (*kissing*). Cuando ambas entran en contacto, forman un cuerpo alargado que es inestable en un fluido newtoniano y que eventualmente se separaría en un movimiento que es denominado *tumbling*.

El presente caso ha sido estudiado por autores como Glowinski et al. (2001) y Uhlmann (2005) quienes acudían al uso de un potencial repulsor para evitar las situaciones de contacto directo entre las partículas. Este último consiste en la aplicación de una fuerza repulsiva proporcional al inverso de la distancia que separa a las partículas; la magnitud de dicha fuerza es definida a partir de una constante arbitraria y no obedece a ninguna ley física derivada del fenómeno estudiado. Detalles al respecto del potencial repulsor pueden hallarse en la publicación de Glowinski et al. (2001).

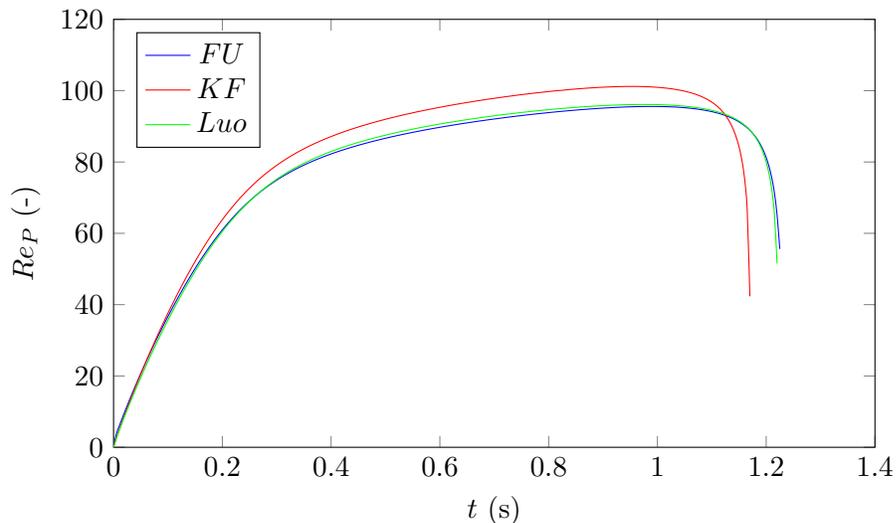


Figura 5.15: Evolución del Re_P a lo largo del tiempo para una partícula sedimentando. Curvas identificadas según método utilizado para la resolución del «step e».

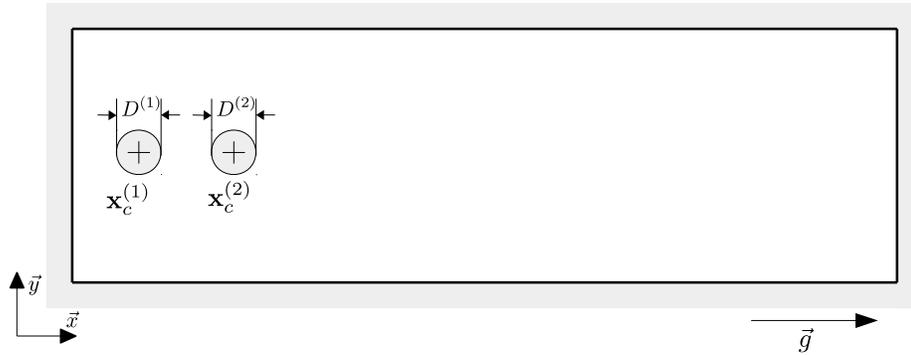


Figura 5.16: Disposición y nomenclatura en el caso de la sedimentación de dos partículas.

En las presentes simulaciones se utiliza el modelo de contacto propuesto por Costa et al. (2015) que fue descrito en el capítulo anterior. Las constantes utilizadas para su configuración consisten en un $e_{n,s} = e_{t,s} = 0.97$, un tiempo de colisión $t_c = 4\Delta t$ y un $\mu_s = 0.3$.

La figura (5.18) muestra capturas de la magnitud del campo de velocidades que se da en el fluido. Se observa que el movimiento que siguen las partículas dista del «*drafting, kissing and tumbling*» que normalmente se da en casos de sedimentación duales.

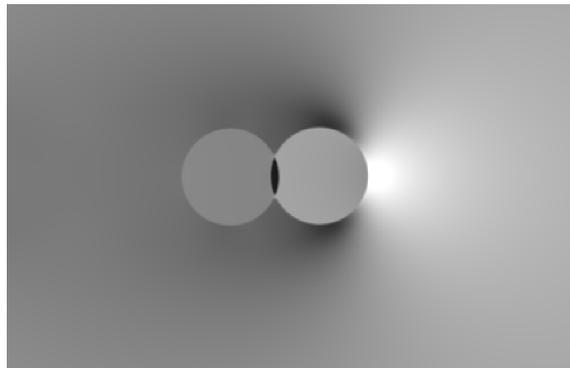


Figura 5.17: Intersección entre partículas sedimentando. Captura del campo de presiones a 1500 timesteps del inicio de la simulación. En negro destaca la zona de intersección.

La partícula que se encuentra retrasada consigue alcanzar a aquella que

lidera el camino según lo esperado. No obstante, el modelo de interacción entre las partículas no es capaz de rechazar el contacto entre los cuerpos y la fuerza de repulsión entra en equilibrio con aquella inducida por el fluido. Las partículas continúan su movimiento unidas a lo largo del dominio, desplazándose de manera recta hasta alcanzar el final del dominio, es decir, el denominado *tumbling* no se hace presente en los resultados de la simulación. Las figuras (5.18) muestran instantáneas de la magnitud del campo de velocidades donde se observa el movimiento que desarrollan los sólidos.

5.5.2. Partículas arrastradas en un canal finito

Dentro de un canal de dimensiones $\Omega = [10 \times 1.25]$ discretizado en $N_x = 1536$ y $N_y = 192$ elementos se disponen 12 partículas monodispersas de diámetro $D = 30h$ y densidad $\rho_p = 1.5\rho_f$. Se fija $\nu = 0.01$ y se define a la gravedad como $\mathbf{g} = (0, -9.81)$.

Las condiciones de contorno se definen como entrada-salida en los costados y de no-deslizamiento en los lados superiores e inferiores, de manera idéntica a los casos de Poiseuille. Las partículas se disponen de manera arbitraria a lo largo del dominio dejando un espacio para un mínimo desarrollo del flujo. Se evalúan casos donde la velocidad de entrada del canal se define como $U_\infty = \nu Re/L_y$ y $Re = 100, 300, 600$ y 1000 para observar el comportamiento de las partículas en su interacción con flujos a distintas velocidades. El paso de tiempo utilizado para las tres primeras simulaciones es de $\Delta t = 0.0001$ mientras que para la segunda es de $\Delta t = 0.00005$.

Las partículas parten del reposo y comienzan a ser transportadas por efectos del fluido y a descender por efectos de la gravedad. Según sea el número de Reynolds del canal estas descenderán rápidamente y se trasladarán en contacto directo con la pared inferior del dominio o conseguirán ser transportadas fuera de ésta sin haber alcanzado el suelo. El contacto con la pared inferior es modelado de acuerdo al modelo de esferas suaves y lubricación descrito anteriormente.

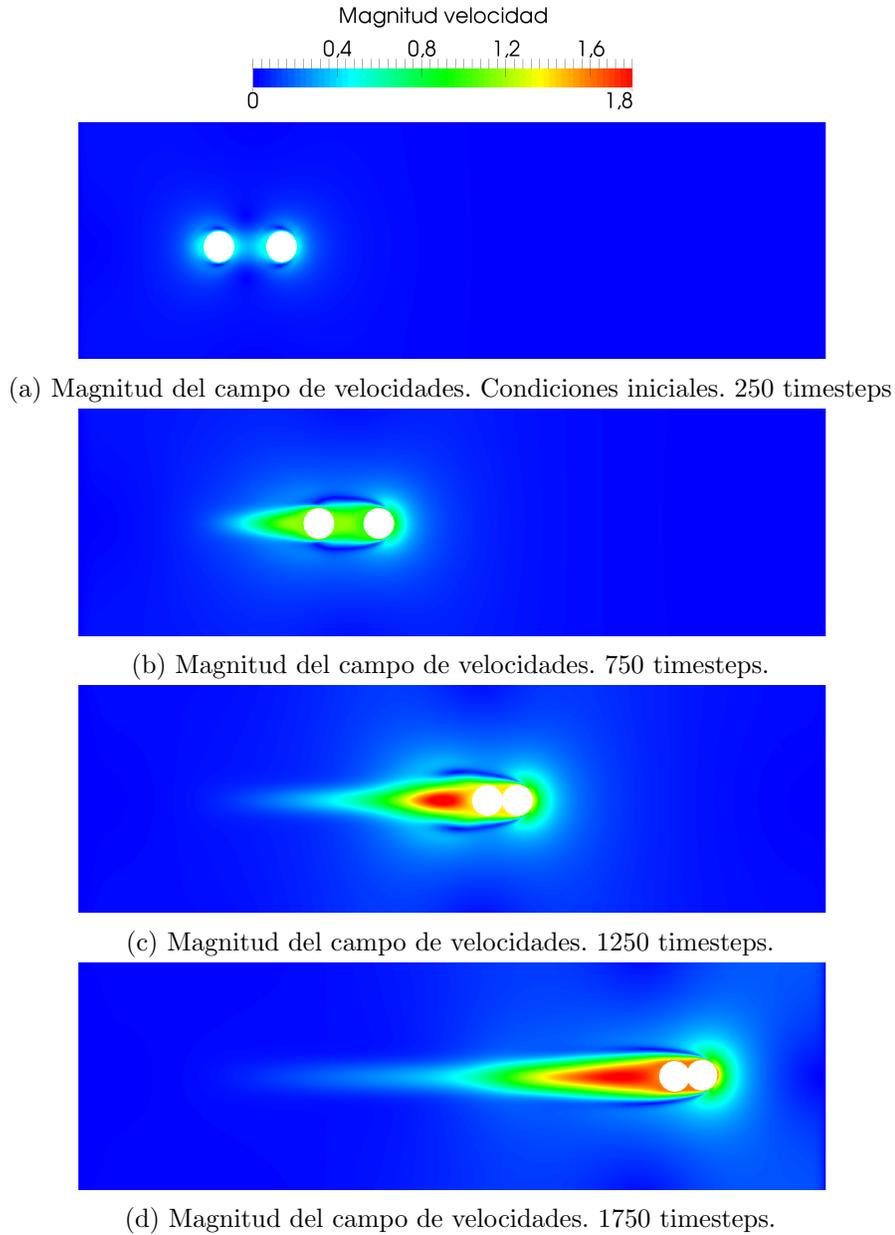


Figura 5.18: Capturas de la magnitud del campo de velocidades para un par de partículas sedimentando. Velocidad adimensionalizada mediante $u_{\text{ref}} = 100\nu/D$.

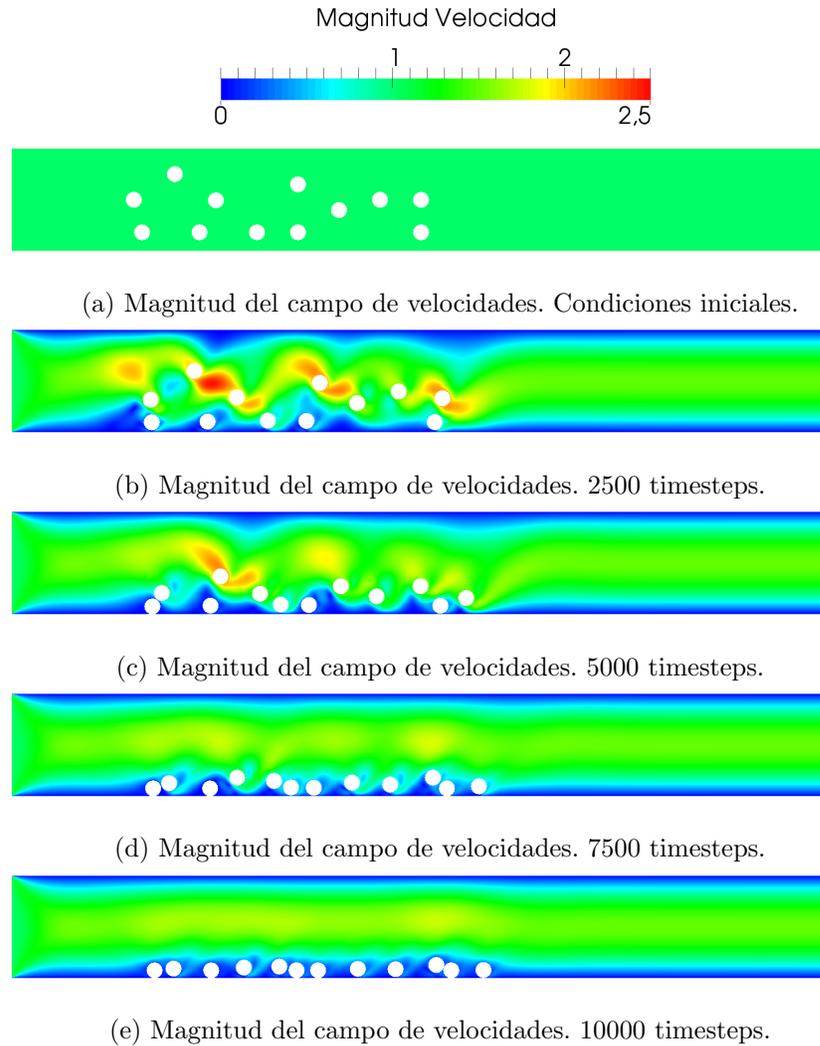


Figura 5.19: Capturas del campo de fluido para partículas advectadas en un canal de dimensiones 10×1.25 a un $Re = 100$. Velocidad adimensionalizada con la magnitud U_∞ .

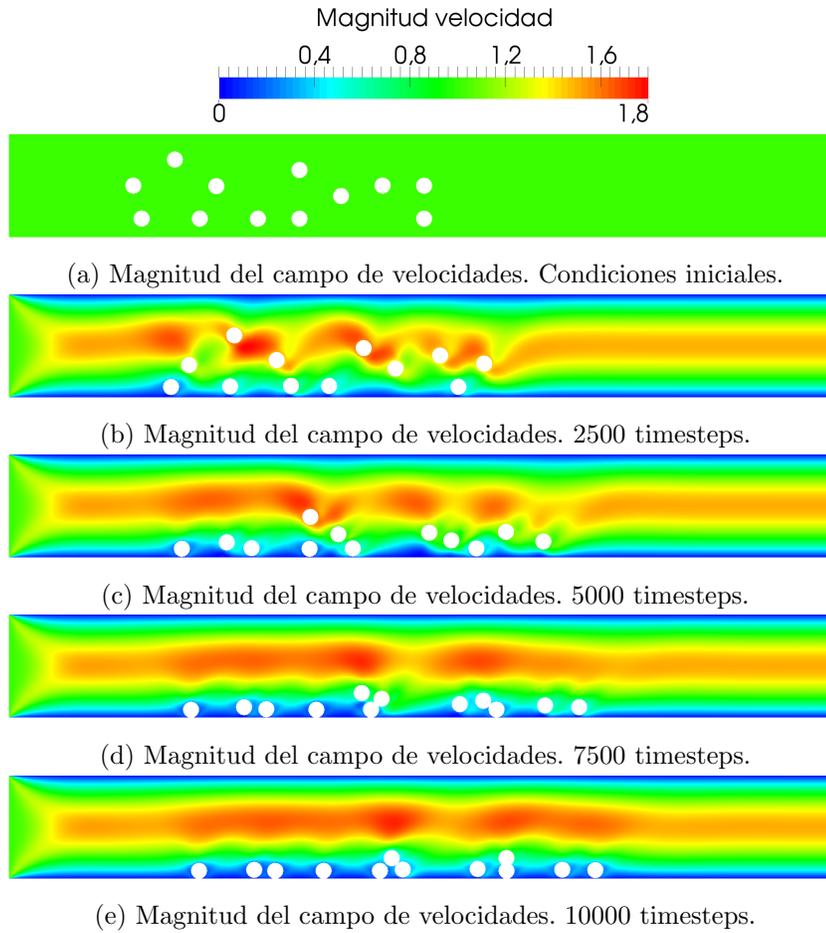


Figura 5.20: Capturas del campo de fluido para partículas advectadas en un canal de dimensiones 10×1.25 a un $Re = 300$. Velocidad adimensionalizada con la magnitud U_∞ .

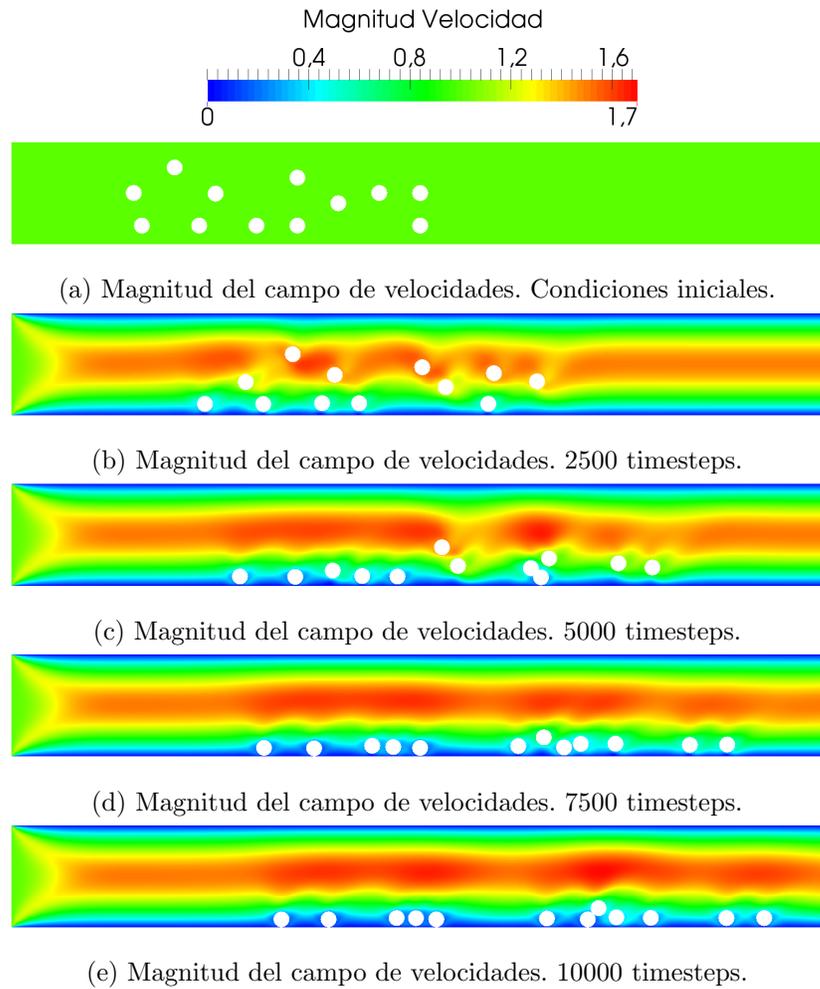


Figura 5.21: Capturas del campo de fluido para partículas advectadas en un canal de dimensiones 10×1.25 a un $Re = 600$. Velocidad adimensionalizada con la magnitud U_∞ .

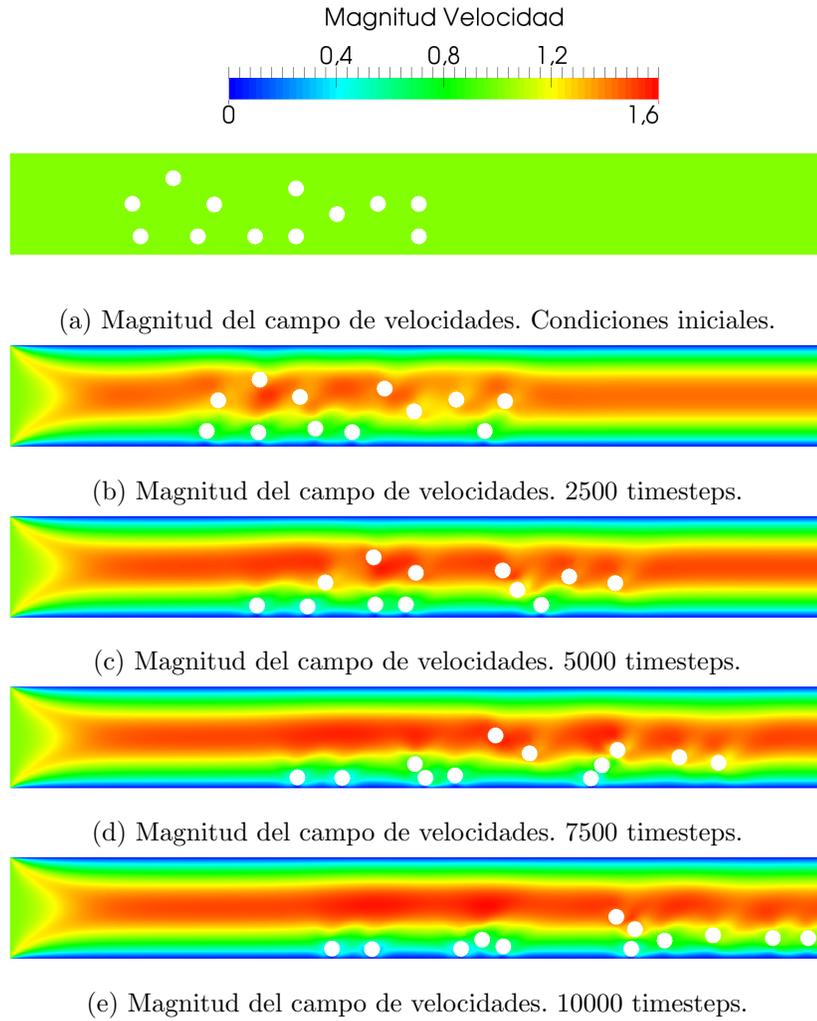


Figura 5.22: Capturas del campo de fluido para partículas advectadas en un canal de dimensiones 10×1.25 a un $Re = 1000$. Velocidad adimensionalizada con la magnitud U_∞ .

Capítulo 6

Conclusiones

Se ha desarrollado un código bidimensional para la simulación de suspensiones sólidas densas y se ha presentado una maqueta para su extensión a tres dimensiones (ver apéndices).

El desprendimiento de los vórtices de Von Kármán se produce debido a una interacción entre los movimientos convectivos del grueso del fluido y la capa límite que se forma alrededor de la partícula. *A grosso modo*, el fenómeno es capturado pues efectivamente existe una zona ralentizada alrededor de la partícula la cual es transportada por el fluido, mas como esta región está pobremente representada mediante el delta de Roma es esperable que existan diferencias moderadas respecto a los valores referenciales de Park et al. (1998) quien efectivamente resuelve la capa límite que surge en el entorno inmediato de la partícula.

Las simulaciones realizadas para el cilindro estacionario (Cuadro 5.1) muestran que el método de la frontera inmersa tiende a sobrestimar el arrastre experimentado por la partícula en comparación a la referencia de Liu et al. (1998). Esto al menos, bajo los esquemas originales de Uhlmann y la variante directa de Luo. En contraste, se observa como la formulación de Kempe y Fröhlich resulta mucho más cercana a los valores patrones que las otras dos alternativas y esto bajo un costo computacional semejante al de la formulación original (ver cuadros (B.1) y (B.2) del apéndice).

Por otra parte, la simulación de la partícula oscilante muestra como el arrastre experimentado por la partícula oscilante y su sustentación se encuentran altamente sobrestimados por la implementación actual del método. El hecho de que la simulación estacionaria de cilindros sea muy cercana a los resultados originales pero que la simulación en movimiento no lo sea resulta curioso, debido a que el cilindro oscilante posee un movimiento prescrito que

no requiere de ser avanzado en el tiempo a través subrutinas de movimiento.

Los problemas para capturar la interacción fluido-sólido en movimiento se han traducido a que los cuerpos sedimentando alcancen una velocidad máxima mucho menor a referenciada por los autores con quienes se comparan los resultados. Fallando este punto, las simulaciones con partículas en movimiento solamente tendrán un carácter referencial puesto que la física asociada a ellas no logra ser capturada adecuadamente. Investigar las causas de esto consistirá en una línea de investigación futura.

Respecto al modelo de interacción entre partículas –lubricación y contacto– se observa que en el caso del par de partículas que sedimentan, el modelo falla y que las partículas se acoplan, desarrollándose un equilibrio entre la fuerza de repulsión y aquella originada debido a la interacción entre cada partícula individual con el fluido. Lo anterior es una evidente falencia del código que evita que se desarrolle el comportamiento de *kissing*, *drafting* y *tumbling* que se observa comúnmente en la literatura. Las causas de este acoplamiento deberán ser estudiadas en detalle en algún trabajo posterior.

No obstante, se destaca que el modelo no falla siempre pues el contacto con la pared en el caso del canal se mantiene estable y las partículas se arrastran por el contorno inferior del dominio, dándose incluso contactos que se resuelven posteriormente sin acoplamiento entre los cuerpos.

En el caso expuesto en el apéndice de partículas en un dominio biperiódico se presencian múltiples colisiones con alta tasa de ocurrencia debido al elevado número de sólidos presentes sin notorios acoplamientos más que aglomeraciones espontáneas de partículas en regiones del fluido.

Lineas de investigación futuras

La sobrestimación del arrastre y la sustentación para las partículas en movimiento son inconsistentes con el certero comportamiento estacionario que se verifica en la presente implementación. Sus causas no fueron halladas a lo largo de este trabajo por lo que el siguiente paso inmediato debería consistir en dilucidar esta problemática.

Se deben hallar estrategias para reducir el tiempo dedicado a la resolución de los pasos a , e y f . El primero, dado que el paso es completamente explícito es un candidato perfecto para una eventual paralelización para la cual se puede tomar como guía el trabajo de Uhlmann (2003). Los pasos restantes constituyen ecuaciones elípticas cuya resolución podría hacer uso de algún solver *ad-hoc* adecuado para resolver ecuaciones sobre campos que no se encuentran completamente centrados ni desplazados como es el caso de las componentes del campo de velocidad, prescindiendo así de la necesidad de interpolar y del error y retraso que ello acarrea.

Por otra parte, se sugiere comparar el modelo de contacto implementado con otros semejantes como aquel de Kempe and Fröhlich (2012b).

Más allá de las problemáticas halladas en el presente código, el siguiente paso sería continuar el desarrollo del modelo tridimensional, para el cual ya se han dejado los primeros cimientos a partir de los cuales trabajar. Existe abundante literatura respecto a colisiones de esferas en tres dimensiones lo cual podría ayudar a elegir, implementar y validar modelos de contacto.

Otra área de investigación que se puede desarrollar es el cambio de la ecuación constitutiva para el tensor de esfuerzos, en pos de evaluar fluidos no-newtonianos que bien podrían representar la modificación que se da en la fase continua debido a la presencia de partículas sólidas de escala menor a la que se puede capturar mediante el método de la frontera inmersa.

Apéndice A

Detalles sobre el método numérico

A.1. Derivación de la formulación de Uhlmann para el método IB

El presente apartado es una adaptación de aquel presentado por Engdahl (2015), modificado de acuerdo a los pasos requeridos para conseguir la formulación de Uhlmann (2005). Considérese la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y). \quad (\text{A.1})$$

Se procede a la integración temporal en los siguientes subpasos temporales, de acuerdo al esquema planteado por Rai and Moin (1991):

$$y^1 = y^{n-1} + \frac{8}{15} \Delta t f(t_{n-1}, y^{n-1}), \quad (\text{A.2a})$$

$$y^2 = y^1 + \frac{5}{12} \Delta t f(t_{n-1} + \frac{8}{15} \Delta t, y^{n-1}) - \frac{17}{60} \Delta t f(t_{n-1}, y^{n-1}), \quad (\text{A.2b})$$

$$y^n = y^2 + \frac{3}{4} \Delta t f(t_{n-1} + \frac{2}{3} \Delta t, y^2) - \frac{5}{12} \Delta t f(t_{n-1} + \frac{8}{15} \Delta t, y^1), \quad (\text{A.2c})$$

donde los niveles de tiempo en cada paso están dados por:

$$t_1 - t_{n-1} = \frac{8}{15} \Delta t, \quad (\text{A.3a})$$

$$t_2 - t_1 = \frac{2}{15} \Delta t, \quad (\text{A.3b})$$

$$t_n - t_2 = \frac{1}{3}\Delta t. \quad (\text{A.3e})$$

A partir de la ecuación (A.1) es posible plantear la siguiente integral entre los niveles de tiempo $n - 1$ y 1:

$$\int_{y^{n-1}}^{y^1} dy = \int_{t_{n-1}}^{t_1} f(y)dt \approx f(y)(t_1 - t_{n-1}). \quad (\text{A.4})$$

Despejando a y^1 de la ecuación (A.4) y realizando un proceso análogo para los otros niveles de tiempo, se obtienen las ecuaciones:

$$y^1 = y^{n-1} + \frac{8}{15}\Delta t f(y), \quad (\text{A.5a})$$

$$y^2 = y^1 + \frac{2}{15}\Delta t f(y), \quad (\text{A.5b})$$

$$y^n = y^2 + \frac{1}{3}\Delta t f(y). \quad (\text{A.5c})$$

Tratando a la derivada temporal de (A.1) mediante el esquema de Crank-Nicolson, las ecuaciones anteriores pueden expresarse de la siguiente forma:

$$y^1 = y^{n-1} + \frac{4}{15}\Delta t (f(y^1) + f(y^{n-1})), \quad (\text{A.6a})$$

$$y^2 = y^1 + \frac{1}{15}\Delta t (f(y^2) + f(y^1)), \quad (\text{A.6b})$$

$$y^n = y^2 + \frac{1}{6}\Delta t (f(y^n) + f(y^2)). \quad (\text{A.6c})$$

En pos de un correcto desarrollo, se retoman las ecuaciones de Navier-Stokes modificadas para la aplicación del método IB, estas son:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{u}}{dt} &= \nu \nabla^2 \mathbf{u} - \nabla p - (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Donde la segunda, proveniente de la conservación de la masa, se aplicará como una restricción sobre la primera en etapas posteriores.

El primer paso aproxima al campo de flujo prescindiendo de los efectos del sólido, por tanto el término \mathbf{f} es omitido y, en vista que no necesariamente es solenoidal, se distingue mediante el símbolo $\tilde{\mathbf{u}}$.

Trabajando dentro de los subpasos temporales de Runge-Kutta, el término convectivo es avanzado de forma explícita de acuerdo a las ecuaciones (A.2)

mientras que los términos restantes son avanzados mediante el método de Euler entre los pasos de tiempo intermedios. De esta forma, se obtienen las ecuaciones:

$$u^1 = u^{n-1} + \Delta t \left(\frac{8}{15} \nu \nabla^2 \mathbf{u}^{n-1} - \frac{8}{15} \nabla p^{n-1} - \frac{8}{15} [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{n-1} \right), \quad (\text{A.8a})$$

$$u^2 = u^1 + \Delta t \left(\frac{2}{15} \nu \nabla^2 \mathbf{u}^1 - \frac{2}{15} \nabla p^1 - \frac{5}{12} [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^1 - \frac{17}{60} [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{n-1} \right), \quad (\text{A.8b})$$

$$u^n = u^2 + \Delta t \left(\frac{1}{3} \nu \nabla^2 \mathbf{u}^2 - \frac{1}{3} \nabla p^2 - \frac{3}{4} [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^2 - \frac{5}{12} [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^1 \right), \quad (\text{A.8c})$$

Las cuales pueden ser abreviadas en:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^{q-1} + \Delta t (2\alpha_q \nu \nabla^2 \mathbf{u}^{q-1} - 2\alpha_q \nabla p^{q-1} \\ - \gamma_q [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{q-1} - \zeta_q [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{q-2}), \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

la cual es idéntica a la ecuación (4.4) con sus respectivas constantes y abreviando el paso de Runge-Kutta a partir del subíndice q .

Se omiten los pasos contenidos entre los «*step b*» y «*step d*» en cuanto sólo consisten en transpadanos de información entre distintos marcos de representación y ya han sido analizadas en el capítulo 4.

Realizando un proceso análogo al (A.9), pero trabajando al término viscoso mediante el método de Crank-Nicolson en vez del de Euler, se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{q-1} + \Delta t (\alpha_q \nu (\nabla^2 \mathbf{u}^{q-1} + \nabla^2 \mathbf{u}^*) - 2\alpha_q \nabla p^{q-1} \\ - \gamma_q [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{q-1} - \zeta_q [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{q-2} + \mathbf{f}^q). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Reuniendo al lado izquierdo los términos con \mathbf{u}^* y «añadiendo y restando» $\alpha_q \nu \Delta t \nabla^2 \mathbf{u}^{q-1}$ al lado derecho, la ecuación anterior se reescribe como:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^* - \alpha_q \Delta t \nu \nabla^2 \mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{q-1} + \Delta t (2\alpha_q \nu \nabla^2 \mathbf{u}^{q-1} - 2\alpha_q \nabla p^{q-1} \\ - \gamma_q [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{q-1} - \zeta_q [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]^{q-2} + \mathbf{f}^q) - \alpha_q \nu \Delta t \nabla^2 \mathbf{u}^{q-1}. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

El lado derecho de (A.11) contiene a (A.9) y por tanto se reemplaza y simplifica la ecuación anterior, resultando en:

$$\nabla^2 \mathbf{u}^* - \frac{1}{\alpha_q \Delta t \nu} \mathbf{u}^* = -\frac{1}{\alpha_q \nu} \left(\frac{\tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} + \mathbf{f}^q \right) + \nabla^2 \mathbf{u}^{q-1}. \quad (\text{A.12})$$

El campo resultante \mathbf{u}^* es posteriormente corregido mediante el método de paso fraccionario cuya derivación en extenso puede hallarse en el apéndice de Engdahl (2015) y en forma resumida en Brown et al. (2001).

Apéndice B

Detalles la implementación bidimensional

B.1. Sobre las operaciones de traspaso de información

Para ejemplificar lo siguiente se utilizará únicamente la primera componente de la velocidad euleriana bidimensional $\mathbf{u} = (u, v)$. Se considerará también que el dominio general es un cuadrado de dimensiones $\Omega = [L \times L]$ que ha sido dividido en N intervalos regulares en cada dirección.

La figura (B.1) permite visualizar la disposición de las variables en el espacio. Nótese que vistas en la dirección x , las componentes de u se encuentran situadas en los extremos de cada intervalo mientras que en la dirección y éstas se encuentran centradas.

Se denomina como «*principal*» a aquella dirección que sea la misma intrínseca a la componente, como en el caso de u y x . Las direcciones restantes son denominadas «*secundarias*». Es evidente que en el ejemplo actual sólo existe una única dirección secundaria que es y .

La numeración del arreglo que constituye u posee la dimensión $[N+1 \times N]$ partiendo desde el número [1] para utilizar la misma convención de estas matrices en el lenguaje Fortran. Se distingue entre la posición «numérica» y la «espacial»: La primera corresponde a la ubicación en el arreglo que almacena la información, por ejemplo, la celda (3, 2) mientras que la segunda corresponde a la posición dentro del dominio de la simulación, por ejemplo (2.0, 1.5).

La figura (B.1) adelanta que debe haber alguna sencilla relación entre la posición numérica y la espacial. Se utilizarán superíndices para enfati-

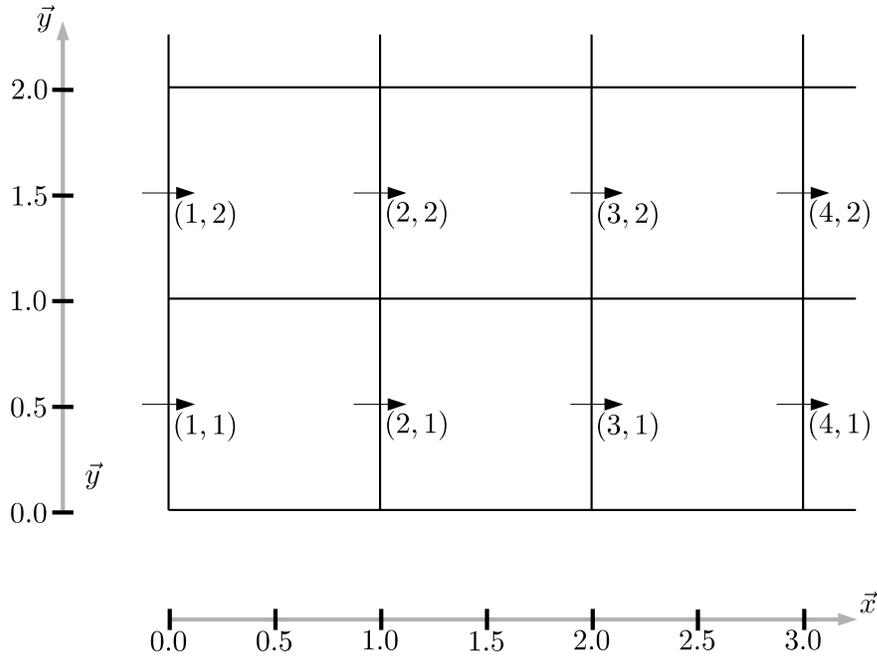


Figura B.1: Disposición espacial de la componente u del campo de velocidades bidimensional. Espaciamiento entre celdas unitario.

zar el carácter de una dirección, primario y secundario. Además la posición numérica se representará mediante $\mathbf{m} = (m_x, m_y)$. De esta forma, las relaciones

$$x^{(p)} = h(m_x - 1/2) \quad (\text{B.1})$$

$$y^{(s)} = h(m_y - 1) \quad (\text{B.2})$$

enlazan la información en el arreglo con sus respectivas coordenadas espaciales $\mathbf{x} = (x, y)$. Estas fórmulas serán relevantes en las etapas de traspaso de información entre marcos eulerianos y lagrangianos.

Se debe recordar que los «marcadores lagrangianos» –simbolizados mediante \mathbf{X}_l – son puntos que pueden estar ubicados en cualquier lugar del dominio. Por medio de las *funciones delta*, éstos interactúan con los nodos fijos de la malla euleriana, lo cual introduce la siguiente pregunta: *¿Qué regla utilizar para enlazar los marcadores a los nodos eulerianos correspondientes de una manera eficiente?*

En el paso (4.5) se desea utilizar la función $\delta^{(2d)}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_l)$ para tomar los valores de $\tilde{\mathbf{u}} = (\tilde{u}, \tilde{v})$ obtenidos por medio de la ecuación (4.4) y transformarlos en su variante lagrangiana $\mathbf{U}_l(\mathbf{X}_l) = (U_l, V_l)$. La posición de los puntos \mathbf{X}_l es conocida y hace falta determinar los puntos eulerianos cuya información debe ser transportada. Se trabajará únicamente con U_l por el carácter expositivo de este apartado.

La malla euleriana de \tilde{u} posee como dirección principal a x y como secundaria a y . Esto determina las funciones para determinar la posición numérica –la ubicación dentro del arreglo– de los nodos eulerianos relacionados con cada marcador. Sea esta posición $\mathbf{m} = (m_x, m_y)$, luego:

$$m_x^{(p)} = \left\| \frac{X_l}{h} \right\| + 1 \quad (\text{B.3})$$

$$m_y^{(s)} = \left\| \frac{Y_l}{h} + \frac{1}{2} \right\| + 1 \quad (\text{B.4})$$

donde $\|\cdot\|$ denota a una función que aproxima a un número real hasta el entero más cercano. Al aplicar ambas funciones, es posible recuperar el nodo más cercano al marcador. Debido al «ancho de banda» de tres nodos que define al delta de Roma, sólo los dos nodos contiguos al recién determinado son de interés.

El procedimiento descrito se aplica para cada componente del vector que esté siendo llevado de un marco al otro, teniendo en consideración cual es la dirección principal y cuales son las secundarias. Además, el llevar información de un marco lagrangiano al euleriano, operación opuesta a la descrita recientemente, hace uso de las mismas funciones en un procedimiento similar.

B.2. Fracción sólida local

El uso del siguiente procedimiento ha sido propuesto en Kempe and Fröhlich (2012a) para una aproximación de la integral (4.17). Se define una fracción sólida local α_{ijk} de modo que:

$$\alpha_{ijk} = \frac{V_{ijk}^p}{V_{ijk}^{cell}} \quad (\text{B.5})$$

donde $V_{ijk}^{cell} = V_c$ es el volumen de la celda cartesiana en la posición ijk de la malla cartesiana y V_{ijk}^p es la intersección entre dicha celda y la partícula. Los índices i , j y k en este caso denotan la posición de un nodo dentro de

la malla euleriana. La idea general consiste en aproximar la ecuación (4.17) como:

$$\int_{\Omega_s} ((\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \mathbf{u}) d\mathbf{x} \approx \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \mathbf{b}_{ijk} \times \mathbf{u}_{ijk} V_c \alpha_{ijk} \quad (\text{B.6})$$

donde b_{ijk} es un brazo que apunta desde el centro de la partícula hacia la ubicación del nodo euleriano con el cual se está trabajando. La estimación de α_{ijk} se realiza una aproximación planar de la superficie de la partícula empleando funciones «*level-set*» ϕ , cuyo signo será negativo al interior de la partícula y positivo en su exterior. Luego,

$$\alpha_{ijk} = \frac{\sum_{m=1}^8 -\phi^{(m)} H(-\phi^{(m)})}{\sum_{m=1}^8 |\phi^{(m)}|} \quad (\text{B.7})$$

En (B.7), $m = 1, \dots, 8$ es un número entero asignado a cada una de las esquinas de un cubo en el cual se envuelve cada nodo euleriano ijk que está siendo evaluado y ϕ_m es la distancia entre la superficie de la partícula –asumida esférica– y cada una de las esquinas mencionadas anteriormente. Por otra parte, $H(\phi)$, es la función de Heaviside definida como:

$$H_\phi = \begin{cases} 0, & \phi \leq 0 \\ 1, & \phi > 0 \end{cases} \quad (\text{B.8})$$

Así, mediante el uso de B.7 es posible conseguir una aproximación relativamente suave para la fracción sólida local en los contornos de la partícula.

Ahora, para la aplicación bidimensional del código, considérese a p como una partícula cualquiera descrita mediante la posición de su centro de masa $\mathbf{x}_c^{(p)} = (x_c^{(p)}, y_c^{(p)})$ y su radio $R^{(p)}$. La integral de la ecuación (4.17) en dos dimensiones se expresará como:

$$\int_{\Omega_s} ((\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \mathbf{u}) d\mathbf{x} \approx \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \mathbf{b}_{ij} \times \mathbf{u}_{ij} V_c \alpha_{ij}. \quad (\text{B.9})$$

Para evitar nomenclatura adicional, describese la ubicación de u_{ij} mediante el par $(\text{pos}_x(u_{ij}), \text{pos}_y(u_{ij}))$. Así, es posible expresar a la ecuación (B.9) como:

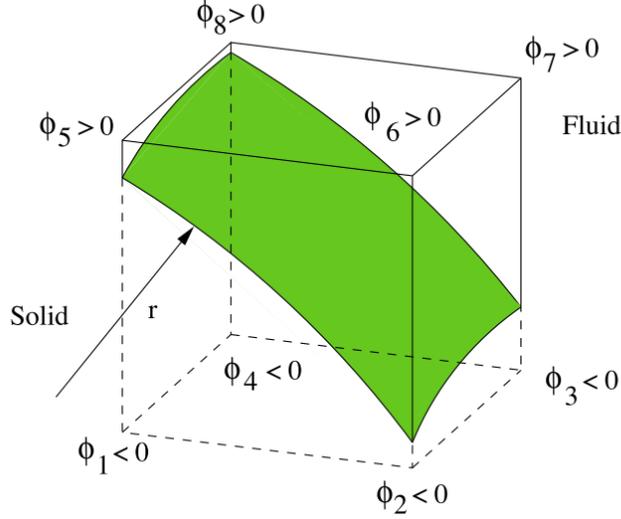


Figura B.2: Esquema para la comprensión de ϕ_m . Extraído de Kempe and Fröhlich (2012a).

$$\int_{\Omega_s} ((\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \mathbf{u}) d\mathbf{x} \approx \left(\sum_{j=1}^{N_y+1} \sum_{i=1}^{N_x} (\text{pos}_x(u_{ij}) - x_c^{(p)}) v_{ij} - \sum_{i=1}^{N_x+1} \sum_{j=1}^{N_y} (\text{pos}_y(v_{ij}) - y_c^{(p)}) u_{ij} \right) V_c \alpha_{ij}, \quad (\text{B.10})$$

donde se debe notar que el valor de α_{ij} tras ser aplicado será diferente para cada miembro del lado derecho de la ecuación anterior. Se expresarán los siguientes pasos sólo en función del primero de estos términos.

Se establecen dos secciones dentro de la partícula, una interior donde existe certeza de que $\alpha_{ij} = 1$ y una corona donde es posible que no lo sea. La distancia que delimita ambas regiones será $\|\mathbf{b}_{ij}\| \leq R^{(p)} - h$.

Se sabe que cualquiera sea la componente de velocidad, esta estará centrada dentro del volumen que la contiene y, por consiguiente, las esquinas de dicho volumen estarán a una distancia absoluta de $\mathbf{d}_{ij}^{(m)} = \mathbf{b}_{ij} + (\pm h, \pm h)/2$, donde $m = \{1, 2, 3, 4\}$ representa cada una de las posibles esquinas según sea la combinación de signos elegida. Luego, la función *level set* puede ser definida como $\phi_{ij}^{(m)} = \|\mathbf{d}_{ij}\| - R^{(p)}$ y con ello, se determina la fracción sólida mediante la versión bidimensional de (B.7), es decir:

$$\alpha_{ij} = \frac{\sum_{m=1}^4 -\phi^{(m)} H(-\phi^{(m)})}{\sum_{m=1}^4 |\phi^{(m)}|} \quad (\text{B.11})$$

Una versión tridimensional de esta función es obtenida de manera análoga y, por tanto, no será expuesta.

B.3. Estructura del código

Como cualquier programa escrito en Fortran, el presente consta de un código principal, *main.f90*, al cual se integran los módulos *dom_parameters*, *mod_structures* y *mod_functions* y desde el cual se inician los llamados a un entramado de subrutinas que constituyen el grueso del trabajo desarrollado y que serán reseñadas a continuación.

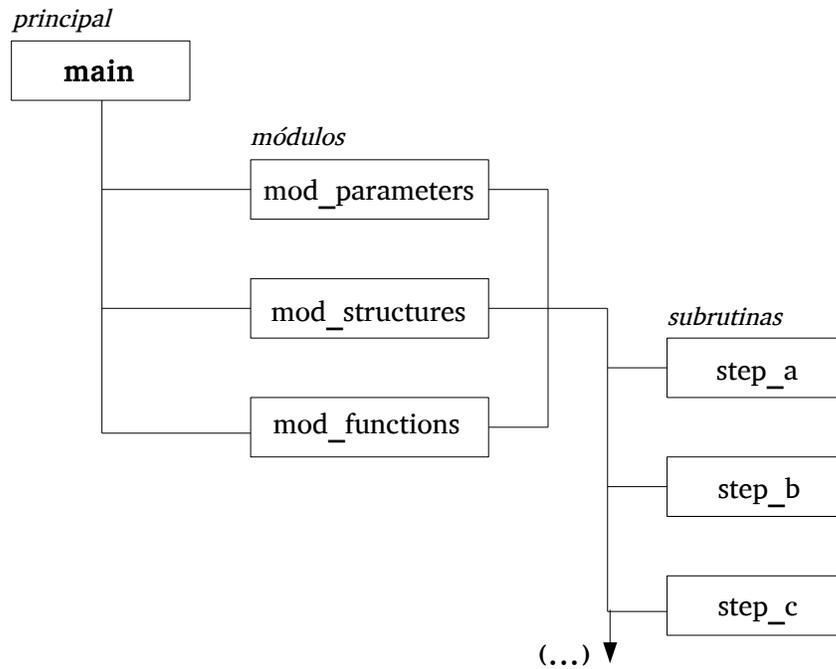


Figura B.3: Esquema general del código desarrollado. Nombres señalados son idénticos a aquellos utilizados para denominar cada subsección del código.

B.3.1. Módulos

- *mod_parameters.f90*: Consiste en el módulo base donde están fijadas las constantes matemáticas del método y desde donde se fijan los principales parámetros del programa. Por ejemplo, algunas de las acciones que se realizan acá son:
 - Definición de las constantes de Runge-Kutta α_q , γ_q y ζ_q .
 - Definición de las propiedades de las fases como densidades ρ_d y ρ_c y la viscosidad cinemática ν .
 - Selección de las condiciones de contorno.
 - Elección de parámetros como el número de partículas N_p , el paso de tiempo Δt , las dimensiones del dominio L_x y L_y , el número de elementos por dirección N_x y N_y , entre otros.
 - Activación/desactivación del movimiento de sólidos, del modelo de contacto, del registro de su movimiento y la frecuencia de esto.
 - Activación/desactivación de la escritura del campo de velocidades y de presión en formato *.vtk*.
 - Selección del método para resolver el «*step e*» y su configuración.
- *mod_structures.f90*: En este módulo están definidas las principales estructuras de datos utilizadas en el programa que tendrán un alcance global. También acá está definido el objeto «*partícula*» que constituye la unidad básica que almacena la representación de cada sólido inmerso.
- *mod_functions.f90*: Reúne a funciones variadas que son requeridas por pasos tales como los transpadanos de información entre diferentes marcos de referencia o la alocaión de las estructuras de dato de los objetos «*partícula*».

B.3.2. Subrutinas

El presente listado engloba a las subrutinas utilizadas a lo largo del código y entrega una pequeña glosa que permite identificar su función principal y su relación con otras subrutinas de ser importante para su comprensión.

- *init_program*: Inicialización del programa. Llamado a las subrutinas que alocan memoria, primeras mediciones que serán posteriormente comparadas, creación de archivos de escritura, entre otros.

- *init_fields*: Inicialización de los campos de velocidad y de presión del fluido de acuerdo a como hayan sido solicitados en el módulo *mod_parameters*.
- *intermission*: Paso intermedio donde se realiza la escritura del campo de velocidades y de presión, la representación *.vtk* de la partícula y se revisa que la simulación no entregue resultados inválidos (NaN).
- *update_fields*: Actualización de los campos de velocidades entre pasos contiguos de Runge-Kutta. Adicionalmente se calculan los coeficientes de arrastre y sustentación si es que así ha sido requerido desde el módulo *mod_parameters*.
- *step_a*: Llamado a las subrutinas que componen el «*step a*».
- *step_a_rhs*: Resolución directa del «*step a*».
- *step_a_boundaries*: Aplicación de las condiciones de contorno correspondientes sobre los arreglos de $\tilde{\mathbf{u}}$.
- *step_b*: Resolución directa del «*step b*».
- *step_c*: Resolución directa del «*step c*».
- *step_d*: Resolución directa del «*step d*».
- *step_e*: Llamado a las subrutinas que componen el «*step e*».
- *step_e_rhs*: Conformación del lado derecho de la ecuación de Helmholtz. En el presente paso se realizan interpolaciones de ser necesario.
- *step_e_x_rhs_bd*: Relleno de las condiciones de contorno de la ecuación de Helmholtz para la posterior obtención de u^* .
- *step_e_y_rhs_bd*: Relleno de las condiciones de contorno de la ecuación de Helmholtz para la posterior obtención de v^* .
- *step_e_mkl_x*: Llamado al solver elíptico de Intel para la obtención de u^* .
- *step_e_mkl_y*: Llamado al solver elíptico de Intel para la obtención de v^* .
- *step_e_recover*: Se adecuan los resultados del solver elíptico al formato utilizado a lo largo del programa. Se aplican las condiciones de contorno correspondientes al problema.

- *step_f*: Llamado a las subrutinas que componen el «*step f*».
- *step_f_rhs*: Conformación del lado derecho de la ecuación de Poisson para la obtención de la pseudo-presión ϕ .
- *step_f_fish*: Llamado al solver elíptico FISHPACK para la resolución de la ecuación de Poisson correspondiente al «*step e*».
- *step_f_rhs_bd*: Relleno de las condiciones de contorno de la ecuación de Poisson.
- *step_f_boundaries*: Aplicación de las condiciones de contorno sobre el campo ϕ según se hayan definido en en *mod_parameters*.
- *step_g*: Resolución del «*step g*» y llamado a la subrutina de condiciones de contorno.
- *step_g_boundaries*: Aplicación de las condiciones de contorno del campo de velocidades \mathbf{u}^g según se hayan definido en en *mod_parameters*.
- *step_h*: Resolución del «*step h*» y llamado a la subrutina de condiciones de contorno.
- *step_h_boundaries*: Aplicación de las condiciones de contorno del campo de presión \mathbf{p}^g según se hayan definido en en *mod_parameters*.
- *measure_time*: Mediciones del «tiempo de reloj» para la determinación del tiempo total de ejecución del programa.
- *screen_report*: Presentación de información de interés por pantalla.
- *dumpdata_vtk*: Escritura de los campos de presión y de velocidad definitivos a un archivo en formato *.vtk* para su compatibilidad con el sistema de visualización *Paraview*.
- *dumpparray_VTK*: Escritura genérica de datos a un formato *.vtk*; contiene múltiples subrutinas (semejantes entre ellas) para llevar a cabo este propósito.
- *recov_mark_position*: Recupera la posición espacial de algún marcador lagrangiano solicitado por el código.
- *check_nan*: Revisa si es que el código no se ha inestabilizado, esto entendido como si ha alcanzado o no valores *NaN*. Normalmente llamado por medio de la subrutina *intermission*.

- *particle_vtk_writer*: Escribe un archivo *.vtk* de un disco escalado apropiadamente al tamaño de una partícula en la posición que ésta debería ocupar en el espacio. Utilizado para complementar la visualización vía *Paraview*.
- *check_markers*: Revisa si los marcadores lagrangianos deben ser excluidos de los cálculos. Las subrutinas aquí contenidas se deben activar para evitar inconsistencias entre las condiciones de contorno de las paredes y la velocidad impuesta por el método de la frontera inmersa.
- *rpk_save*: Guarda en un archivo de texto las condiciones cinemáticas de una partícula en el determinado timestep donde es llamada.
- *cdl_save*: Guarda en un archivo de texto el arrastre y la sustentación de una partícula en el determinado timestep donde es llamada.
- *cdl_compute*: Determina los coeficientes de arrastre y sustentación para una partícula de haber sido solicitado así en el módulo *mod_parameters*.
- *pff_save*: Permite el registro de los valores de algún o algunos nodos a lo largo del tiempo hacia un archivo. Configurable directamente en la subrutina y activado en el módulo *mod_parameters*.
- *save_fields*: Centraliza a todas las subrutinas que registran información puntual en archivos, como *pff_save*, *cdl_save* y *rpk_save* y, adicionalmente, *intermission*.
- *set_particles*: Crea a todas las partículas (como estructura según han sido definidas en *mod_structures*). Adicionalmente fija sus valores iniciales de posición y velocidad.
- *allocate_structures*: Aloca a los arreglos eulerianos requeridos durante el programa.
- *deallocate_structures*: Desaloca los arreglos eulerianos creados en *allocate_structures*.
- *mov_begin_iterations*: Fija los valores iniciales para el ciclo iterativo asociado a las cantidades cinemáticas de las partículas.
- *mov_compute_movement*: Determina las variaciones de posición y de velocidad de las partículas de acuerdo a las fuerzas del fluido que actúan sobre ella y de las fuerzas de contacto que han sido determinadas en el presente paso iterativo.

- *mov_correct_omega*: Determina la corrección de velocidad angular al interior de la partícula según es requerido por la subrutina *mov_compute_movement*.
- *mov_end_iterations*: Recupera los valores convergidos después de un ciclo iterativo y los almacena en las variables estándar. Actualiza los campos de velocidad lagrangianos para cada marcador.
- *mov_iterative_error*: Determina el error entre iteraciones consecutivas pertenecientes a la misma serie.
- *mov_particle_movement*: Subrutina principal para llamar a los subpasos que permiten la integración temporal de la partícula.
- *mov_prescribed_movement*: Fuerza el movimiento de las partículas de acuerdo a alguna regla que sea fijada en su interior.
- *c_clean_variables*: Limpia las variables históricas del modelo de colisión una vez que el contacto se ha acabado.
- *c_compose_matrix*: Arma la matriz que permite rotar el desplazamiento tangencial entre pasos consecutivos.
- *c_contact_force*: Determina la fuerza de contacto entre dos partículas.
- *c_contact_force_wall*: Determina la fuerza de contacto entre una partícula y la muralla.
- *c_contact_model*: Ordena a las subrutinas que componen el modelo de contacto y de lubricación en general.
- *c_contact_wall*: Ordena a las subrutinas que componen el modelo de contacto y de lubricación entre murallas y partículas.
- *c_lubrication_force*: Determina la fuerza de lubricación entre partículas.
- *c_lubrication_wall*: Determina la fuerza de lubricación entre partícula y muralla.
- *additional_forcing*: Permite ejecutar los pasos de forzado adicional propuestos por Kempe and Fröhlich (2012a).
- *multidirect_forcing*: Permite ejecutar los pasos de forzado multidirecto propuestos por Luo et al. (2007).

- *additional_step_b*: Ejecuta un paso adicional del «textitstep b» con las modificaciones requeridas para el forzado de Kempe and Fröhlich (2012a).
- *check_intersections*: Revisa si existe contacto entre partículas cuando estas son distribuidas de manera aleatoria a lo largo del dominio.
- *end_program*: Desalocación de la memoria establecida a lo largo de la simulación y llamado final a la subrutina *measure_time*.

B.4. Configuración de una simulación

La presente sección busca ejemplificar el uso del programa en un caso elemental como es el del cilindro estacionario. Se usará un dominio cuadrado $\Omega = [0, 8] \times [0, 8]$ discretizada en $N_x = N_y = 512$ elementos. La figura (B.4) muestra la sección del código donde se fijan las condiciones de contorno y el número de elementos por dirección.

El parámetro *SIMULATION* = 1 consiste en el set de condiciones de contorno utilizados para esta simulación, es decir, entrada-salida en la dirección x y simetría en la dirección y .

La figura (B.5) muestra la sección del código donde se muestra la mayoría de los parámetros de relevancia.

- «*NumParticles*» fija el número de partículas que se emplazarán en el dominio. En este caso se elige una única partícula y por lo tanto *NumParticles* = 1.
- «*t_max*» limita el número máximo de pasos de tiempo en los que se ejecutará el programa, una vez alcanzado la simulación se detendrá automáticamente.
- «*IntermissionEvery*» fija cada cuantos pasos de tiempo se ejecutará la subrutina *intermission*. En esta etapa se realizan pasos de escritura a un archivo *.vtk* y deben ser realizados con moderación para almacenar datos innecesarios ni destinar tiempo excesivo en pasos de escritura que podrían no aportar información relevante.
- «*Dt*» es el paso de tiempo utilizado Δt .
- «*Lx*» y «*Ly*» fijan las dimensiones del dominio. Nótese que L_y está subordinado al valor de L_x y a la cantidad de elementos dispuestos en cada dirección.

```

#####
##### DOMAIN DEFINITION #####
#####
INTEGER, PARAMETER :: Nx = 512
INTEGER, PARAMETER :: Ny = 512

#####
##### POSSIBLE SIMULATIONS #####
#####
! # [E] : ESTABLE           [I] : INESTABLE

! # 1 [E] : CILINDRO INFINITO EN UN FLUJO UNIFORME
! # 2 [I] : CONTORNOS CON VELOCIDAD CERO.HOMOGENEOUS NEUMANN FOR PRESSURE.
! # Seguramente los problemas se deben a la interpolación en el paso e.
! # 3 [E] : PERIODIC IN EVERY DIRECTION
! # 4 [E] : ONE DIRECTION W/SYMMETRY AND THE OTHER W/DIRICHLET.
! # 5 [I] : POISEUILLE FLOW. X-PERIODIC. Y-DIRICHLET (NO-SLIP)
! # Pérdidas de masa al simular Poiseuille.
! # 6 [I] : ABAJO: NO-SLIP, ARRIBA: SIMETRÍA, COSTADOS: PERIODICIDAD.
! # Está fallando el llamado a FISHPACK
! Problemas en la subrutina step_e_recover.
! # 7 [I] : SIMETRÍA EN TODOS LOS CONTORNOS.
! # Oscilaciones en el campo de velocidad
! # 8 [E] : POISEUILLE FLOW, INLET-OUTLET.

INTEGER, PARAMETER :: SIMULATION = 1

```

Figura B.4: Sección del código *mod_parameters.f90* donde se fijan las condiciones de contorno y se establecen la cantidad de elementos a discretizar N_x y N_y .

- « H » es el paso espacial y se define automáticamente a partir de los valores anteriores.
- « Nu » es la viscosidad cinemática del fluido, pensada para ser ingresada en unidades del SI en primera instancia.
- « RHO_C » y « RHO_D » corresponden a las densidades de la fase continua y la discreta respectivamente.
- « $D_REFERENCE$ » es una longitud referencial que, a menos que se intervenga el código directamente, será el diámetro de la circunferencia que se dispondrá en el dominio.
- « $Prescribed_Reynolds$ » es el Re_P del flujo alrededor de la partícula. En este caso, $Re_P = 100$. « $U_REFERENCE$ » es la velocidad del flujo

```

#####
##### MAIN PARAMETERS #####
#####
INTEGER, PARAMETER :: NumParticles = 1
INTEGER, PARAMETER :: t_max = 60000
INTEGER :: IntermissionEvery = 5000
REAL (KIND=8), PARAMETER :: Dt = 1e-4 * 5

! ## DOMAIN DEFINITION
REAL (KIND=8), PARAMETER :: Lx = 8.
REAL (KIND=8), PARAMETER :: Ly = Lx * REAL(Ny,8) / REAL(Nx,8)
REAL (KIND=8), PARAMETER :: H = Lx / REAL(Nx,8)
REAL (KIND=8), PARAMETER :: DV_l = H * H

! ## PHYSICAL CONSTANTS
REAL (KIND=8), PARAMETER :: NU = 0.01
REAL (KIND=8), PARAMETER :: RHO_C = 1.0d3
REAL (KIND=8), PARAMETER :: RHO_D = 1.5 * RHO_C
REAL (KIND=8), PARAMETER :: G = 9.810d0
REAL (KIND=8), DIMENSION(2), PARAMETER :: G_VECTOR = G * (/ 1.0d0, 0.0d0 /)

! ## FLOW
REAL (KIND=8), PARAMETER :: D_REFERENCE = 19.2 * H
REAL (KIND=8), PARAMETER :: Prescribed_Reynolds = 100.0
REAL (KIND=8), PARAMETER :: U_REFERENCE = Prescribed_Reynolds &
                                     * NU / (D_REFERENCE)
REAL (KIND=8), PARAMETER :: P0 = 0.0d0

INTEGER, PARAMETER :: DelayWriting = 0

LOGICAL, PARAMETER :: RandomParticleDistribution = .FALSE.

#####
##### PRESCRIBED MOVEMENT (PM) #####
#####

! Overrides other movements. Updates velocity and position according to a
! prescribed movement law in the subroutine 'mov_prescribed_movement.f90'.
! Requires AllowParticleMovement = .TRUE.

LOGICAL, PARAMETER :: PM_Activate = .FALSE.

```

Figura B.5: Sección del código *mod_parameters.f90* donde se fijan las condiciones de contorno y se establecen la cantidad de elementos a discretizar N_x y N_y .

en unidades del SI. Nótese que se define en función del número de Reynolds, la longitud referencial y la viscosidad cinemática.

El resto de los parámetros de la imagen se omiten por no ser relevantes para el presente ejemplo. Sus detalles se pueden ver al interior del código fuente.

```

#####
##### COMPUTE DRAG AND LIFT (CDL) #####
#####
! Writes the mean drag and lift forces into a file named 'Drag and Lift #NN' for
! the particle number NN.

INTEGER, PARAMETER :: CDL_ProbeEvery = 20
LOGICAL, PARAMETER :: CDL_Activate = .FALSE.
LOGICAL, PARAMETER :: CDL_WeightForcesRK = .FALSE.

#####
##### MOVEMENT AND CONTACT MODELS #####
#####
! Here there are parameters related to the movement of the particle and the
! collision models.

LOGICAL :: AllowParticleMovement = .FALSE.
LOGICAL, PARAMETER :: ContactModelling = .FALSE.
INTEGER, PARAMETER :: CM_PossibleContacts = (NumParticles)*(NumParticles-1)/2
INTEGER, PARAMETER :: CM_SolveCollisionInXSteps = 4
REAL(KIND=8), PARAMETER :: CM_Threshold = 3*H !User defined
REAL(KIND=8), PARAMETER :: CM_EDry = 0.97
REAL(KIND=8), PARAMETER :: CM_MU = 0.3

```

Figura B.6: Sección del código *mod_parameters.f90* donde se fijan las condiciones de contorno y se establecen la cantidad de elementos a discretizar N_x y N_y .

La figura (B.6) muestra la sección referente al cálculo de arrastre (*drag*) y sustentación (*lift*). Para su activación, el booleano «*CDL_Activate*» debe estar fijado como verdadero, es decir, «*TRUE*». En la imagen expuesta el cálculo de estos parámetros se encuentra desactivado.

De forma similar, las rutinas de movimiento y se colisión se activan en la sección inferior de la misma figura, respectivamente, por medio de los booleanos «*AllowParticleMovement*» y «*ContactModelling*». Debido a que la simulación consiste en un único cuerpo que se mantendrá estacionario, ambos deben mantenerse como falsos (es decir «*FALSE*»).

La última figura de la sección, (B.7), muestra arriba como se crea la estructura partícula («*c(1)*») y abajo como se fijan las cantidades cinemáticas

de la misma.

- « $c(1)\%diameter$ » asocia la longitud de referencia fijada anteriormente al diámetro de la partícula. Análogamente, « $c(1)\%density$ » asocia la densidad de la fase discreta, « RHO_D », a aquella de la partícula.
- Las subrutinas « $particle_basics$ », « $allocate_particle$ » y « $shape_circle$ » desarrollan parámetros más complejos de la partícula como su área e inercia, alocan memoria a ciertos arreglos que se le asocian y distribuyen los puntos lagrangianos alrededor de su circunferencia.
- Finalmente, « $c(1)\%Xc$ », « $c(1)\%Uc$ » y « $c(1)\%Oc$ » representan la posición del centro de masa, la velocidad traslacional y la velocidad rotacional de la partícula « $c(1)$ » respectivamente.

```

ELSE
  c(1)%diameter = D REFERENCE
  c(1)%density = RHO_D
  call particle_basics(c(1))
  call allocate_particle(c(1))
  call shape_circle(c(1))
END IF

SELECT CASE(NumParticles)
  CASE (1)
    c(1)%Xc(1) = 0.23125 * Lx
    c(1)%Xc(2) = 0.5 * Ly
    c(1)%Uc(1) = 0.0d0
    c(1)%Uc(2) = 0.0d0
    c(1)%Oc = 0.0

```

Figura B.7: Sección del código *mod_parameters.f90* donde se fijan las condiciones de contorno y se establecen la cantidad de elementos a discretizar N_x y N_y .

Fijados todos los parámetros anteriormente mencionados, se está en condiciones de compilar e iniciar el código para la simulación de un cilindro estacionario.

	FU [512]	KF [512]	Luo [512]
<i>step a</i> (%)	31.8	29.3	78.1
<i>step b</i> (%)	0.0	0.0	0.0
<i>step c</i> (%)	0.0	0.0	0.0
<i>step d</i> (%)	0.4	0.4	1.0
<i>step e</i> (%)	29.9	36.1	4.9
<i>step f</i> (%)	30.3	21.0	7.2
<i>step g</i> (%)	5.6	10.3	5.3
<i>step h</i> (%)	2.0	2.8	3.5
t (s)	2.92	2.94	1.19

Cuadro B.1: Distribución porcentual del tiempo de cálculo dentro de un timestep completo del código desarrollado. Valores determinados para 4 ejecuciones de 200 ciclos cada una. Se remarca el carácter únicamente referencial de los valores porcentuales debido a una amplia variabilidad en la distribución de los tiempos de cálculo. El tiempo informado al final de la tabla es el aproximado para la ejecución de un timestep completo.

B.5. Comparación de tiempos de cálculo

Para la comparación de los tiempos de cálculo se elige el mismo dominio utilizado para las simulaciones de partículas estacionarias y oscilantes, es decir, entrada-salida y condiciones de simetría. Los parámetros de relevancia son $\nu = 0.01$, $L_x = L_y = 8$, $D/h = 20$ y $\Delta t = 0.0005$.

La ejecución de los programas es altamente variable por lo que los valores presentados deben ser considerados como una referencia únicamente.

Los cuadros (B.1) y (B.2) muestran la distribución aproximada de los tiempos de cálculo para mallas de distinta cantidad de elementos por dirección –señalados entre corchetes– así como también el tiempo promedio utilizado en la resolución de un timestep completo.

Destaca que el método de Luo es siempre más rápido que la formulación original de Uhlmann y la de Kempe y Fröhlich. Lo anterior es evidente pues su uso vuelve innecesario al llamado al solver elíptico en el «*step e*» que consiste en una de las principales fuentes de consumo de tiempo en las otras dos variantes.

Por otra parte también destaca la cercanía en el tiempo de cálculo entre la formulación de Uhlmann y la de KF, dando cuenta de que los pasos introducidos por los últimos no representan un costo mayor en términos

	FU [1024]	KF [1024]	Luo [1024]
<i>step a</i> (%)	39.1	33.7	67.8
<i>step b</i> (%)	0.0	0.0	0.0
<i>step c</i> (%)	0.0	0.0	0.0
<i>step d</i> (%)	0.5	0.6	1.1
<i>step e</i> (%)	36.7	53.7	7.0
<i>step f</i> (%)	18.1	6.2	13.5
<i>step g</i> (%)	3.4	3.9	5.7
<i>step h</i> (%)	2.2	2.0	5.0
t (s)	18.81	19.80	10.92

Cuadro B.2: Distribución porcentual del tiempo de cálculo dentro de un timestep completo del código desarrollado. Valores determinados para 4 ejecuciones de 200 ciclos cada una. Se remarca el carácter únicamente referencial de los valores porcentuales debido a una amplia variabilidad en la distribución de los tiempos de cálculo. El tiempo informado al final de la tabla es el aproximado para la ejecución de un timestep completo.

computacionales, lo que sumado a la gran mejora en la representación de fenómenos de arrastre y sustentación en cuerpos estacionarios, lo vuelve fuertemente atractivo.

Otro hecho relevante es el gran tiempo dedicado a resolver el «*step a*» el cual al ser explícito e inherentemente separado en dos (o tres) bloques diferentes según sea la velocidad a calcular, es un fuerte candidato a ser paralelizado en trabajos posteriores.

Si se trata de una única partícula la que se está resolviendo, se observa que los pasos contenidos entre el «*step b*» y el «*step d*» son absolutamente despreciables en comparación con el resto del código.

El cuadro (B.3) muestra como varían los tiempos de cálculo tras agregar un número N_P de partículas. Se observa que entre el «*step b*» y «*step d*» nunca llegan a ocupar un tiempo considerable dentro del programa, ni siquiera con 500 partículas al interior del volumen. En dicho punto, el tiempo dedicado al movimiento de las partículas y a calcular sus colisiones es aproximadamente un cuarto de aquél requerido para resolver las ecuaciones de Helmholtz, lo que muestra la relevancia de dichas ecuaciones dentro del programa. Asimismo, el «*step a*» también en el mismo punto requiere más de el doble del tiempo que es asociado a las partículas, por lo que mantiene su gran relevancia dentro del programa.

	$N_P = 5$	$N_P = 50$	$N_P = 100$	$N_P = 200$	$N_P = 500$
<i>step a</i> (%)	40.3	25.4	43.2	40.1	24.4
<i>step b</i> (%)	0.0	0.1	0.3	0.5	1.1
<i>step c</i> (%)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.1
<i>step d</i> (%)	0.5	0.5	0.6	0.7	1.5
<i>step e</i> (%)	36.1	36.1	34.0	42.9	39.2
<i>step f</i> (%)	17.6	32.4	15.4	7.8	18.2
<i>step g</i> (%)	3.5	2.6	2.6	2.6	2.6
<i>step h</i> (%)	1.9	1-8	1.5	1.5	1.9
M/C (%)	0.0	1.0	2.3	3.8	10.8
t (s)	20.28	16.77	21.40	19.82	20.12

Cuadro B.3: Distribución porcentual del tiempo de cálculo dentro de un timestep completo del código desarrollado según número de partículas N_P . Valores determinados para 2 ejecuciones de 200 ciclos cada una, bajo la formulación de Uhlmann y en una malla cuadrada con $N = 1024$. Se remarca el carácter únicamente referencial de los valores porcentuales debido a una amplia variabilidad en la distribución de los tiempos de cálculo. El tiempo informado al final de la tabla es el aproximado para la ejecución de un timestep completo.

B.6. Recuento de los problemas conocidos del código

El programa desarrollado que complementa a esta tesis posee un número de problemas que han sido identificados y seguramente otros que aún pasan desapercibidos, como es propio para cualquier código en sus fases iniciales.

Algunos poseen su causa bien determinada y otros siguen como problemas abiertos. El presente es un listado que pretende dar cuenta de todos aquellos desperfectos que no consiguieron ser arreglados a la fecha de escritura del presente documento.

- **Pérdidas de masa:** Al desarrollar un flujo de Poiseuille bajo condiciones periódicas en x y no-deslizamiento en y , se verifican pérdidas de masa progresivas a lo largo del tiempo, la fuente de las cuales no ha sido aún determinada. Esto ocurre tanto un perfil inicial uniforme que se desarrolla en el tiempo como para un perfil inicial parabólico ya desarrollado, con y sin gradiente de presión prescrito. Esto produce que tras un tiempo prolongado el perfil de velocidades que debiera mantenerse parabólico y constante a lo largo del tiempo tienda al reposo. Dicho comportamiento se ha hallado únicamente para este juego de condiciones de contorno, manteniéndose el resto estables en términos de la masa contenida en el dominio.
- **Enlazamiento entre partículas:** Como pudo observarse en el caso de dos partículas sedimentando, hay ocasiones en que las partículas tras colisionar permanecen unidas pues las fuerzas elásticas entran en equilibrio con aquellas producidas por método de la frontera inmersa. Se especula que esto podría ser corregido desactivando los nodos lagrangianos que se traslapan en el contacto entre los sólidos sin embargo, esto debe ser puesto a prueba en trabajos futuros.
- **Estabilidad en contacto continuo:** Cuando muchas partículas entran en contacto continuo, existe una posibilidad de que el código se detenga debido a problemas en la convergencia de la posición de las partículas. Se debe recordar que la posición de éstas es determinada de acuerdo a un método iterativo que está acoplado con la determinación de las fuerzas de contacto. Es posible que cuando hayan contactos múltiples, el sistema de partículas no alcance una convergencia debido a oscilaciones en las fuerzas producidas entre los distintos pares de partículas. Actualmente esto se ha apaleado relajando la tolerancia

requerida por el solver iterativo y evitando simulaciones que impliquen contacto continuo.

- **Resolución del «step e»:** Existen combinaciones de condiciones de contorno a partir de las cuales no se consiguieron resultados estables. El surgimiento de dichas inestabilidades –que generalmente aparecen como oscilaciones superpuestas al campo de velocidades– fue rastreado en cada una de ellas a la resolución de ecuaciones de Helmholtz. Las combinaciones anteriormente referidas fueron las siguientes:
 - Dirichlet en todos los contornos (no-deslizamiento).
 - Periodicidad en el eje x y simetría/no-deslizamiento en las caras restantes del dominio.
- **Inconsistencia en C_D y C_L :** Resulta muy extraño que los coeficientes de arrastre y sustentación estén bien determinados para el caso estacionario pero que fallen cuando la partícula entra en movimiento. Especialmente cuando esto ocurre para un movimiento prescrito como el caso del cilindro oscilante. Las causas de este fenómeno no se han hallado a la fecha de presentación de este documento.

B.7. Partículas transportadas en un entorno periódico

Se define un dominio cuadrado $\Omega = [0, 10] \times [0, 10]$ discretizado en $N_x = N_y = 512$ intervalos en cada dirección. Los parámetros físicos para las simulaciones consisten en $\nu = 0.01 [m^2/s]$, $\rho_c = 1000 [kg/m^3]$, $\rho_d/\rho_c = 1.5$ y se omiten los efectos de la gravedad.

Se distribuye un número N_P de partículas en el espacio cuyo diámetros y posición inicial son generados partir del uso de números pseudo-aleatorios por medio de la función *RANDOM_NUMBER* integrada al compilador *Intel Fortran*¹.

Se define $D_{\min} = 15h$ como el diámetro mínimo que han de tener las partículas a distribuir. Luego se establece que el diámetro de la partícula i -ésima será:

¹De acuerdo a «*Intel(R) Fortran Compiler 16.0, User and Reference Guide*», la función acopla dos generadores separados los cuales en conjunto producen números reales pseudo-aleatorios con un periodo aproximado de 10^{18} y que satisfacen una distribución uniforme en $[0, 1]$.

$$D_i = D_{\min}(1 + 3f_i), \quad (\text{B.12})$$

donde f_i es un número aleatorio generado mediante *RANDOM.NUMBER*, único para esta instancia de la partícula i . Destaca que a partir de lo anterior, se define $d_{\max} = 4d_{\min}$.

Una vez se han distribuido los diámetros de las partículas, se procede al emplazamiento de éstas dentro del dominio Ω . Para ello utiliza el método detallado a continuación. Arbitrariamente se ha decidido fijar como condición inicial una velocidad dependiente de un Reynolds referencial $Re_P = 100$ para la partícula de diámetro mínimo d_{\min} , de este modo, el campo de velocidades inicial consiste en $\mathbf{u} = (\nu Re_P / d_{\min}, 0)$

Para el inicio de la simulación, se mantienen las partículas estacionarias por 500 pasos de tiempo con el objetivo de que aparezcan los efectos de la condición de no-deslizamiento sobre el campo de flujo, produciendo perturbaciones que se superponen al flujo uniforme con el cual se inicial el flujo. Posterior a esto, los cuerpos se dejan libres permitiendo que se desplacen e interactúen dentro del dominio Ω . Considerando a $\alpha_s = \sum_{p=1}^{N_P} A_p / L^2$ como la fracción sólida del dominio, donde A_p corresponde al área de p-ésima partícula. Se realizan simulaciones a concentraciones de $\alpha_s \approx 10, 20, 30$ y 40% cuyos resultados se muestran en las siguientes imágenes.

Se destaca que las partículas son capaces de traspasar los contornos periódicos de manera suave y sin problemas. Adicionalmente las simulaciones se desarrollan de manera estable y continua hasta que se fuerza la detención del programa.

Se observa que en todas las simulaciones el fluido tiende al reposo. Lo anterior se debe probablemente a efectos del término sumidero introducido al trabajar con el método de la frontera inmersa y por la disipación de energía asociada a la presencia de partículas. Uhlmann (2005) sugiere trabajar con un campo de forzado euleriano modificado cuando el dominio es periódico en todas las direcciones. De este modo define un $\mathbf{f}^* = \mathbf{f} - \bar{\mathbf{f}}$, donde $\bar{\mathbf{f}}$ es el valor medio del campo. Quedará pendiente para trabajos futuros el evaluar los efectos de dicha modificación.

De las simulaciones actuales bastará con referir que el programa fue capaz de simular hasta 133 ($\alpha_s \approx 0.4$) de manera estable a lo largo del tiempo con modelos de colisión y lubricación actuando continuamente.

B.7.1. Distribución aleatoria de partículas

Se distribuye un número N_P de partículas circulares en un dominio cuadrado $\Omega = [0, L] \times [0, L]$. El diámetro de las partículas está acotado entre

los números reales d_{\min} y d_{\max} .

Considérese N_{\max} como el número máximo de iteraciones para el posicionamiento de un solo cuerpo. Luego, el *loop* iterativo –escrito en pseudocódigo– consistirá en:

```

DO  $p = 1, N_P$ 
  DO  $i = 1, N_{\max}$ 
    CALL RANDOM_NUMBER( $r_1, r_2$ )
     $x_c^{(p)} = (1 - \frac{2d_{\max}}{L})Lr_1$  ;  $y_c^{(p)} = (1 - \frac{2d_{\max}}{L})Lr_2$ 
    CALL check_intersections(FLAG)
    IF (FLAG == .TRUE.) EXIT
    IF (i ==  $N_{\max}$ ) STOP
  END DO
END DO

```

Donde *check_intersections* es una subrutina que evalúa la distancia entre partículas $d_{pj} = \|\mathbf{X}_c^{(p)} - \mathbf{X}_c^{(j)}\| - d^{(p)} - d^{(j)}$ para todo $j < p$. De haber alguna intersección entonces el booleano FLAG será falso (*FLAG* == *.FALSE.*) y se repetirá la ubicación aleatoria del centro de la partícula. De ser verdadero se acabará el loop iterativo (comando EXIT) y se pasará a la siguiente partícula hasta alcanzar el máximo de cuerpos a ubicar en el dominio.

El presente método es rudimentario pero se ha probado efectivo hasta un $\alpha_s \approx 40\%$ utilizando $N_{\max} = 10^6$, suficiente para poner a prueba el código en concentraciones densas.

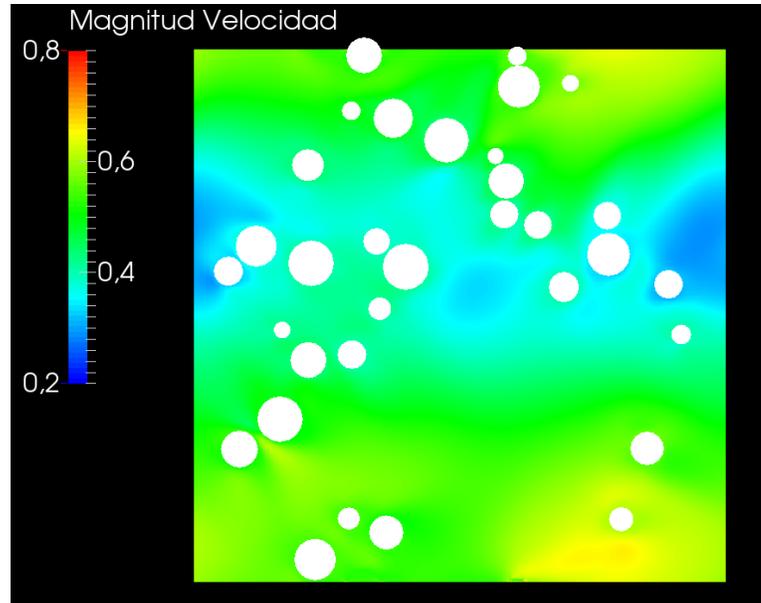
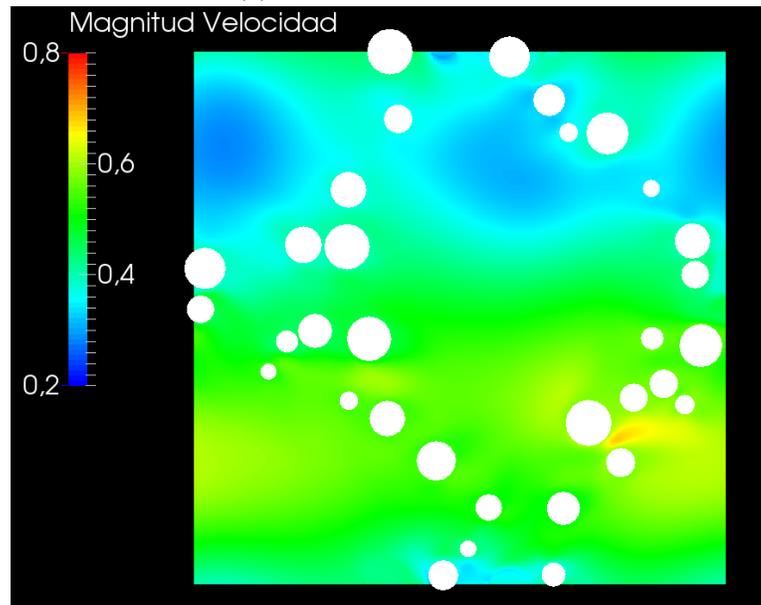
(a) $\alpha_s = 9.80\%$, $t = 50000$ (b) $\alpha_s = 9.80\%$, $t = 60000$

Figura B.8: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno biperiódico con 33 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 9.80\%$).

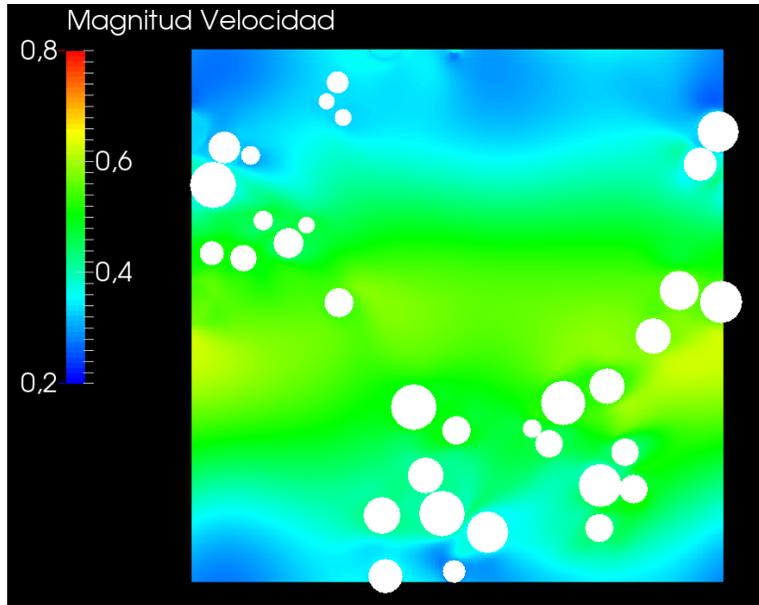
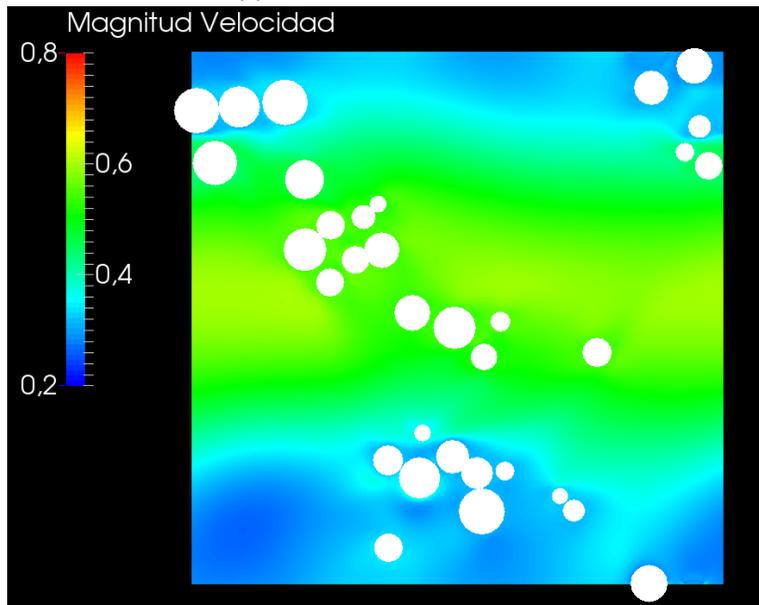
(c) $\alpha_s = 9.80\%$, $t = 70000$ (d) $\alpha_s = 9.80\%$, $t = 80000$

Figura B.8: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno biperiódico con 33 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 9.80\%$).

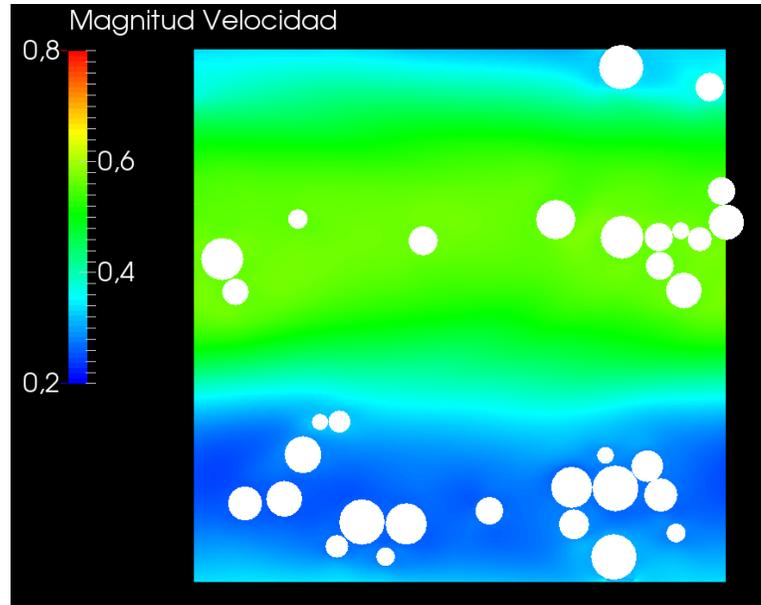
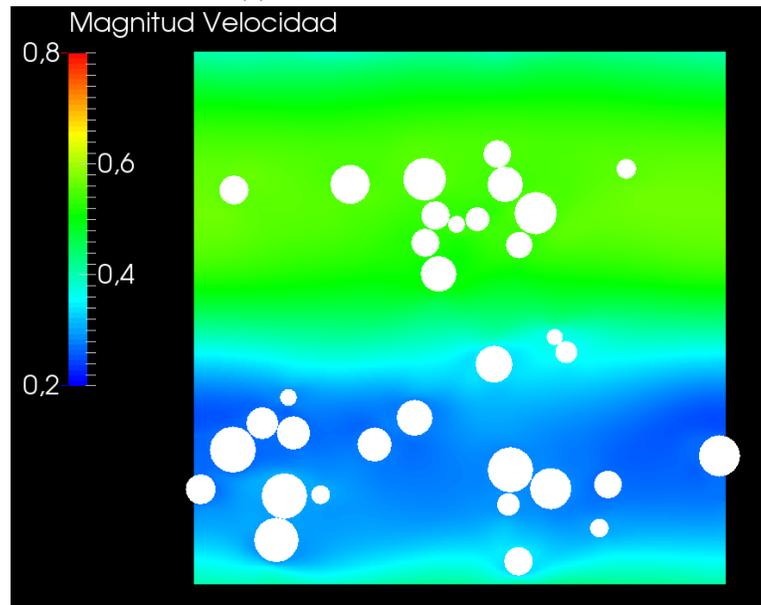
(e) $\alpha_s = 9.80\%$, $t = 90000$ (f) $\alpha_s = 9.80\%$, $t = 100000$

Figura B.8: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno bipe-riódico con 33 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 9.80\%$).

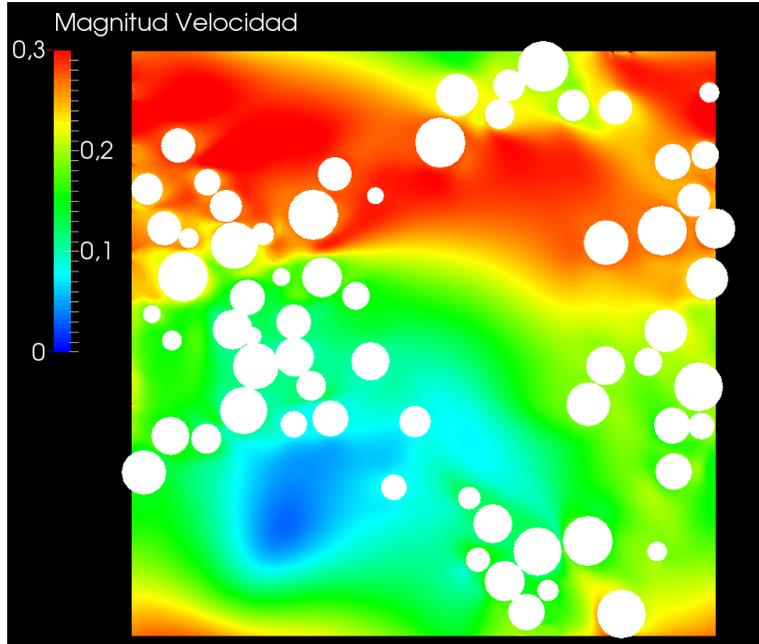
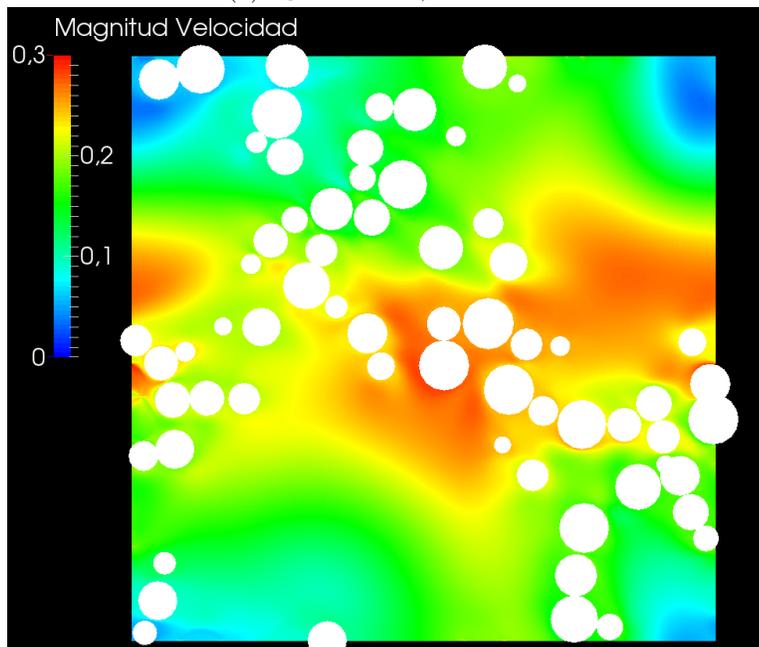
(a) $\alpha_s = 20.13\%$, $t = 50000$ (b) $\alpha_s = 20.13\%$, $t = 60000$

Figura B.9: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno biperiódico con 66 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 20.13\%$).

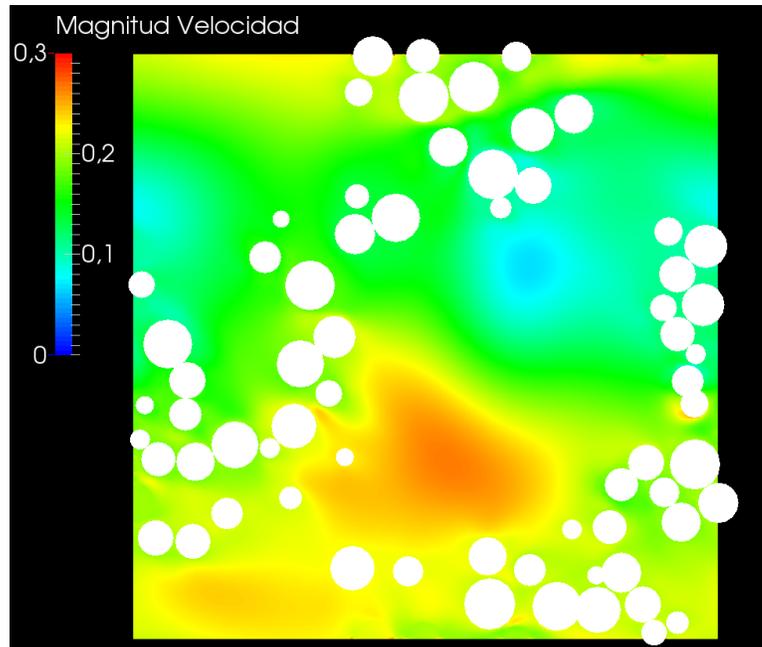
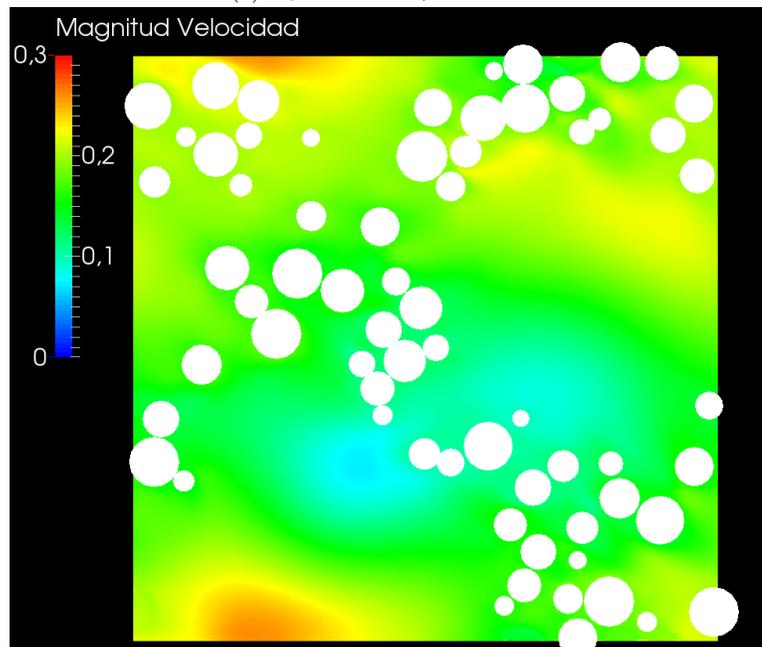
(c) $\alpha_s = 20.13\%$, $t = 70000$ (d) $\alpha_s = 20.13\%$, $t = 80000$

Figura B.9: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno biperiódico con 66 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 20.13\%$).

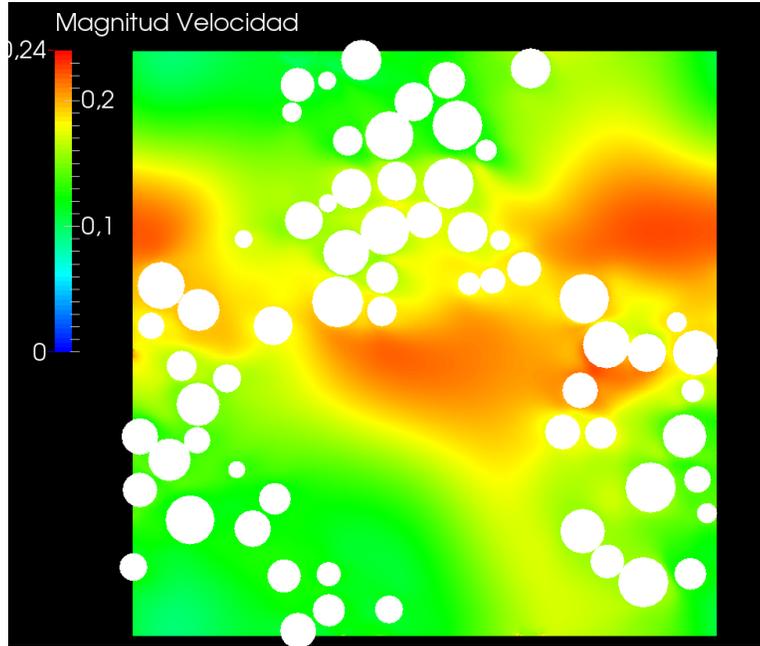
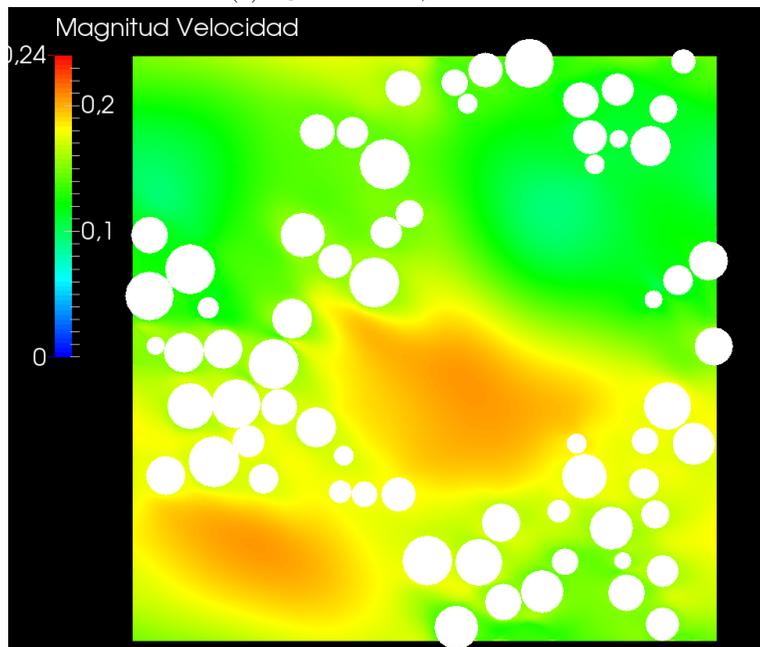
(e) $\alpha_s = 20.13\%$, $t = 90000$ (f) $\alpha_s = 20.13\%$, $t = 100000$

Figura B.9: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno biperiódico con 66 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 20.13\%$).

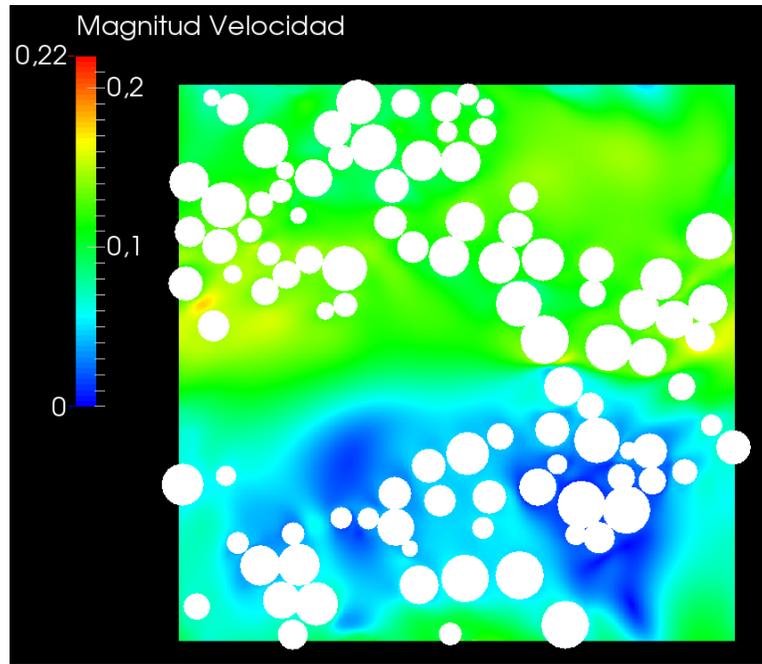
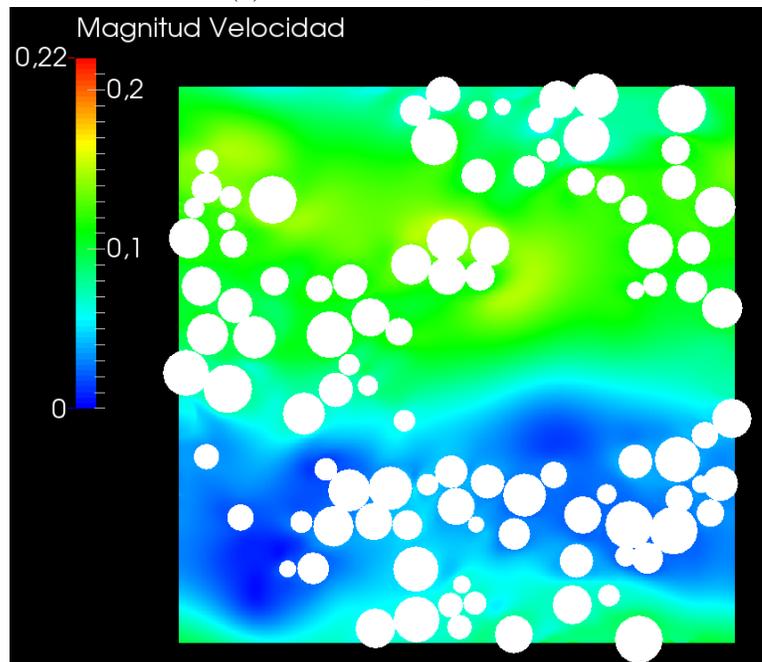
(a) $\alpha_s = 29.77\%$, $t = 50000$ (b) $\alpha_s = 29.77\%$, $t = 60000$

Figura B.10: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno bipe-riódico con 100 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 29.77\%$).

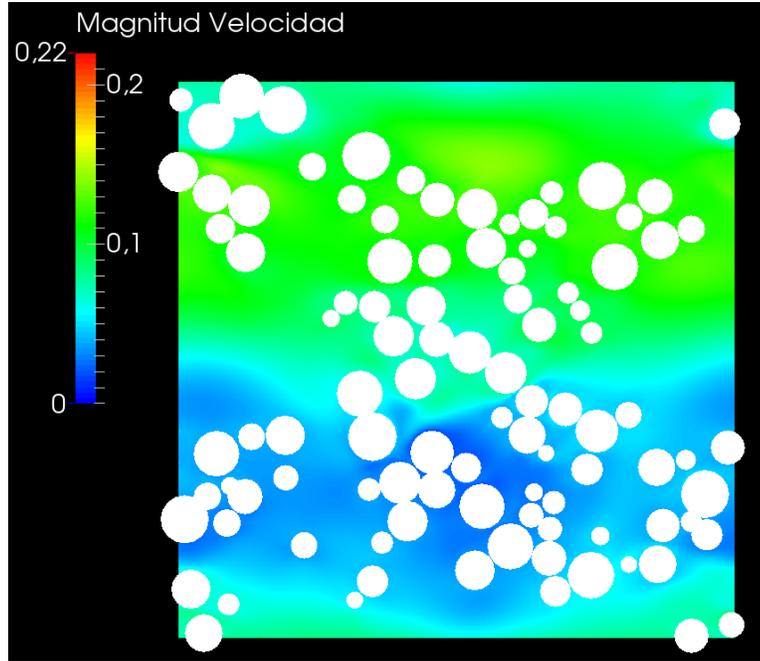
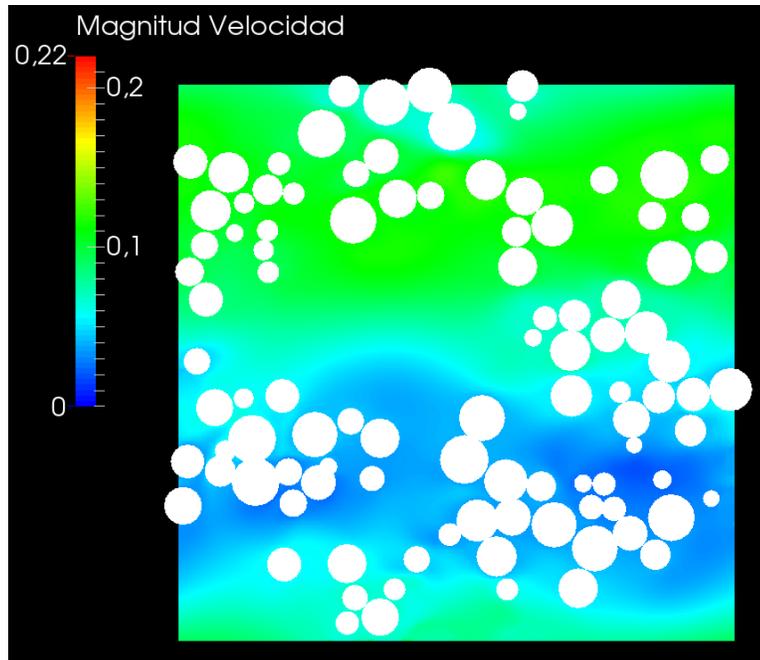
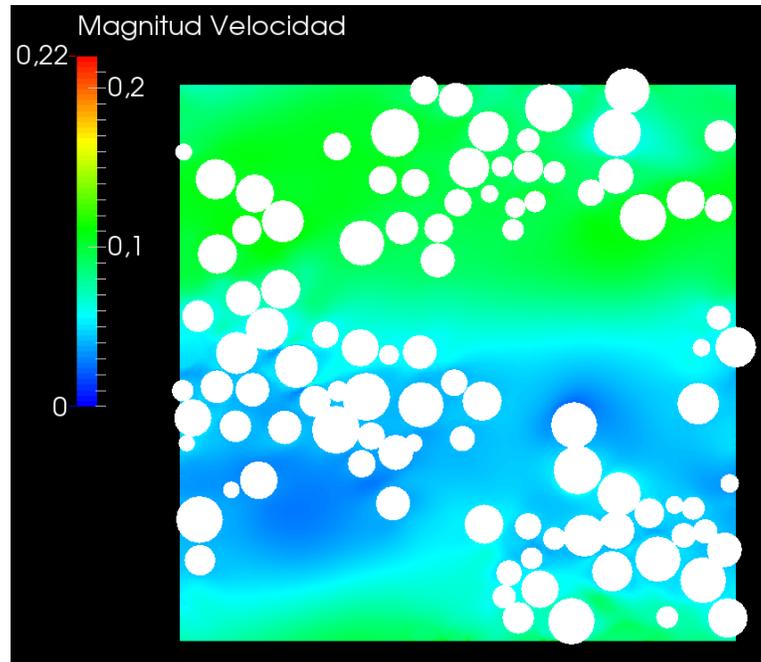
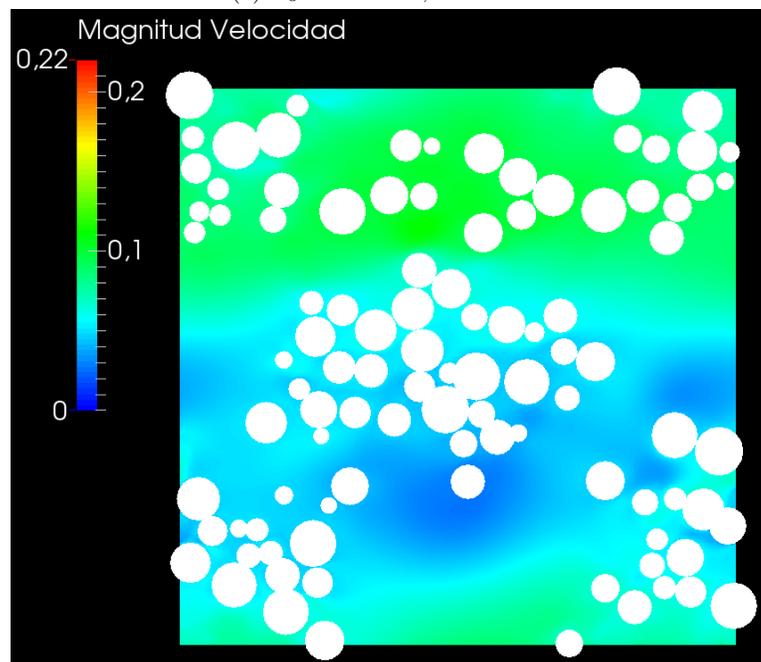
(c) $\alpha_s = 29.77\%$, $t = 70000$ (d) $\alpha_s = 29.77\%$, $t = 80000$

Figura B.10: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno biperiódico con 100 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 29.77\%$).



(e) $\alpha_s = 29.77\%$, $t = 90000$



(f) $\alpha_s = 29.77\%$, $t = 100000$

Figura B.10: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno biperiódico con 100 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 29.77\%$).

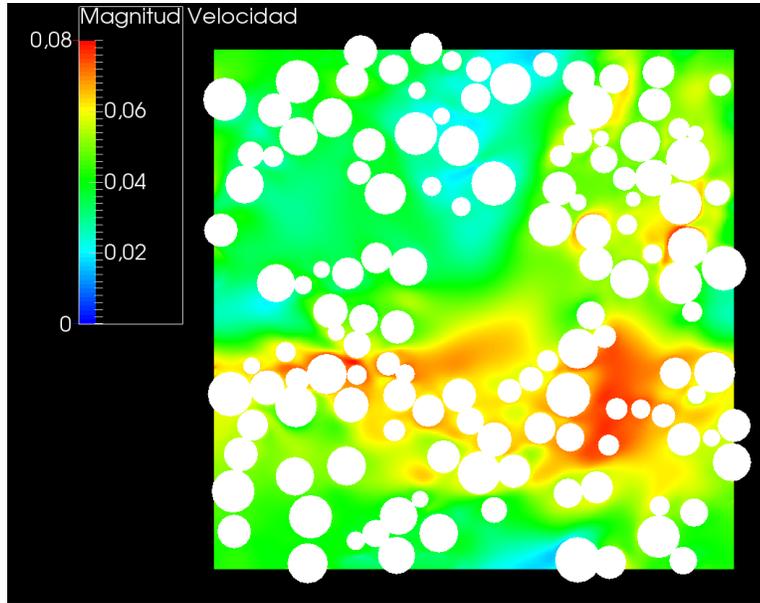
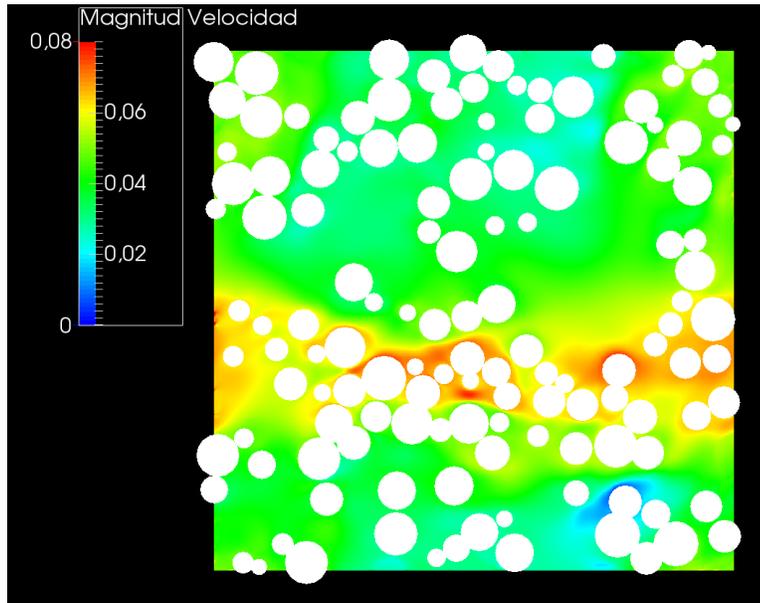
(a) $\alpha_s = 39.76\%$, $t = 50000$ (b) $\alpha_s = 39.76\%$, $t = 60000$

Figura B.11: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno biperiódico con 133 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 39.76\%$).

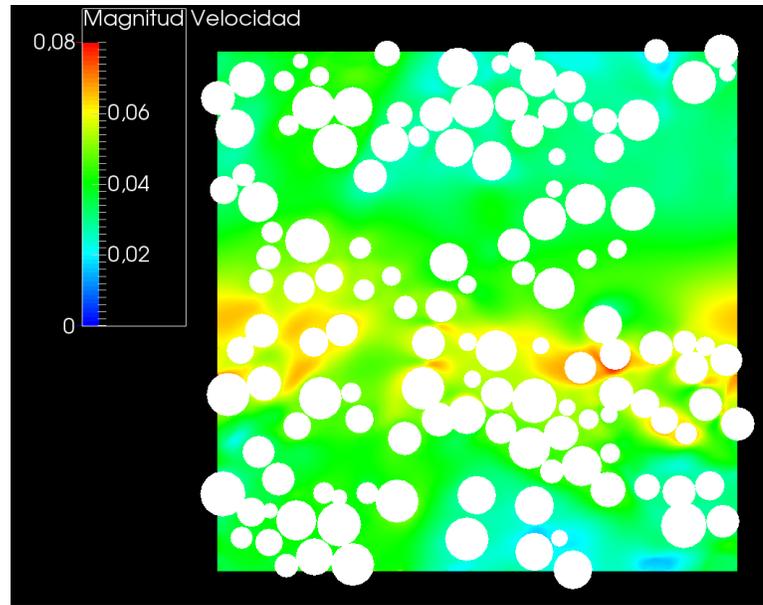
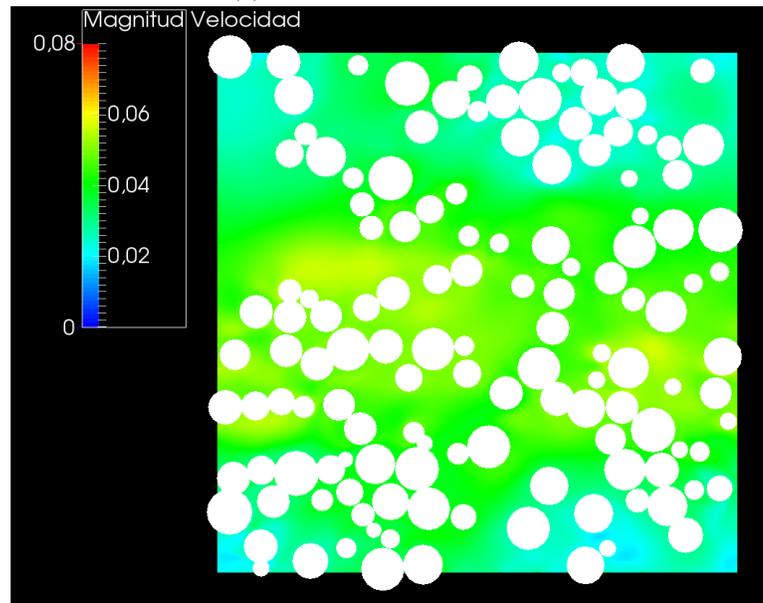
(c) $\alpha_s = 39.76\%$, $t = 70000$ (d) $\alpha_s = 39.76\%$, $t = 80000$

Figura B.11: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno biperiódico con 133 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 39.76\%$).

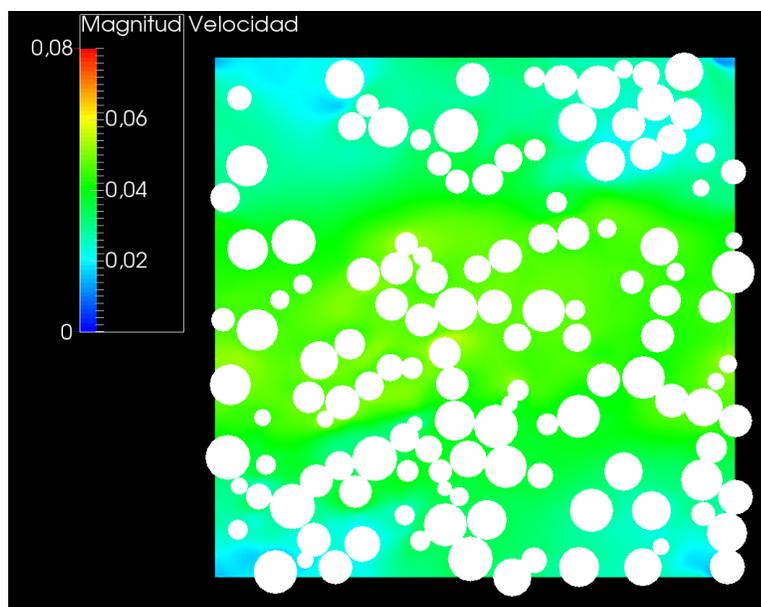
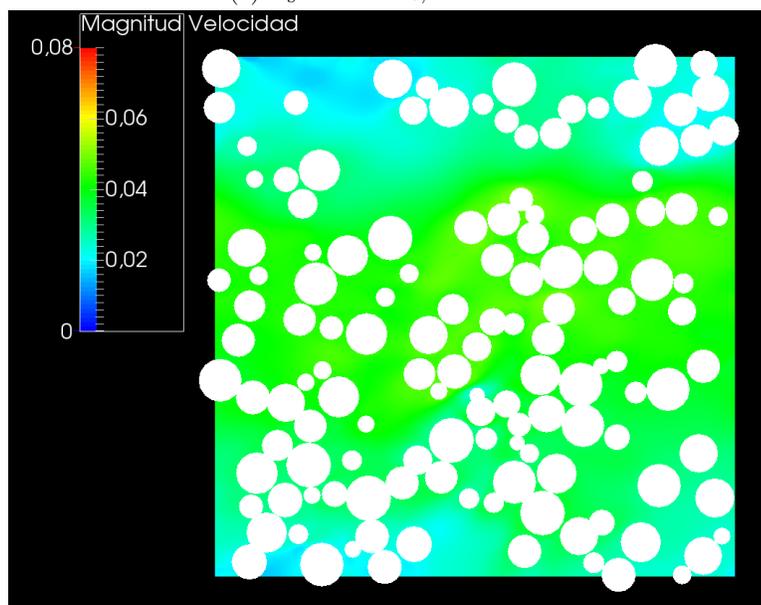
(e) $\alpha_s = 39.76\%$, $t = 90000$ (f) $\alpha_s = 39.76\%$, $t = 100000$

Figura B.11: Capturas de pantalla del campo de flujo en un entorno biperiódico con 133 partículas polidispersas sumergidas ($\alpha_s = 39.76\%$).

Apéndice C

Aplicación tridimensional

Se presentan a continuación trabajos para el desarrollo posterior de una aplicación tridimensional, que constituiría la extensión del trabajo en dos dimensiones.

La discretización de las ecuaciones diferenciales es implementada en el lenguaje Fortran de manera secuencial, programado en pos de priorizar la eficiencia y de ser compatible con una posterior paralelización. E

De igual manera que en el caso plano, se utilizó una malla *staggered* para la distribución de las variables primitivas del fluido, *i. e.* velocidad y presión, y se ha utilizado la librería *MKL* de Intel en su versión 13.1 para la resolución de las ecuaciones de Poisson y de Helmholtz.

Las simulaciones derivadas del código desarrollado si bien son estables y son capaces de representar el contorno de cuerpos sumergidos, no fue capaz de representar la física esperada de una partícula esférica estacionaria y, por tanto, se presentan solamente de forma referencial.

C.1. Dominio euleriano

El espacio se discretiza en $[N_x, N_y, N_z]$ elementos respectivamente según se indica en la figura (C.1), de modo que el paso en cada una de las direcciones ortogonales será idénticamente h . Se recalca que la «equiespacialidad» en discretización es demandada por el método implementado y de este modo, la expresión $h = L_x/N_x$ y sus análogas para \vec{y} y \vec{z} permiten relacionar las tres direcciones ortogonales que componen el sistema de referencia.

Las variables eulerianas estarán distribuidas bajo el esquema desplazado o *staggered*. De este modo, el tamaño de los arreglos asociados se puede extraer de la figura (C.2). Notar que los esquemas que prosiguen serán con-

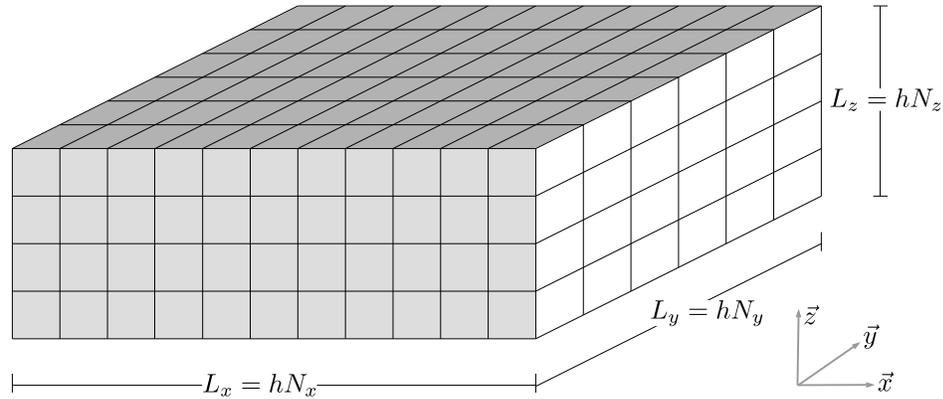


Figura C.1: Dominio euleriano utilizado en las simulaciones tridimensionales.

sistentes con la numeración ahí expuesta.

Los campos escalares como la presión y «pseudo-presión» estarán definidos en el centro de cada volumen de control y por tanto, poseerán $[N_x, N_y, N_z]$ elementos. Por otra parte, las componentes de los campos vectoriales, como la velocidad $\mathbf{u} = (u, v, w)$, poseerán una unidad adicional en la dirección que será denominada como «*principal*». La componente u , por ejemplo, está asociada a la proyección del vector \mathbf{u} sobre la dirección \vec{x} y esa misma será la denominada principal.

Esto implicará que bajo el esquema anterior, el arreglo para la componente de velocidad u tendrá las dimensiones $[N_x + 1, N_y, N_z]$. Las direcciones distintas a la principal serán denominadas «*secundarias*». Esta terminología se adopta para simplificar posteriores explicaciones.

Todos los campos vectoriales eulerianos seguirán la misma estructura, ya sea el término de forzado \mathbf{f} o las distintas versiones intermedias del vector de velocidad como $\tilde{\mathbf{u}}$.

C.2. Dominio lagrangiano

La figura tridimensional canónica para la representación de una partícula sólida es la esfera. En este caso la dificultad del problema incrementa radicalmente respecto al caso plano en cuanto aún es un problema abierto la distribución de puntos sobre la superficie esférica [Popko (2012)].

El único método exacto para distribuir puntos sobre una esfera corres-

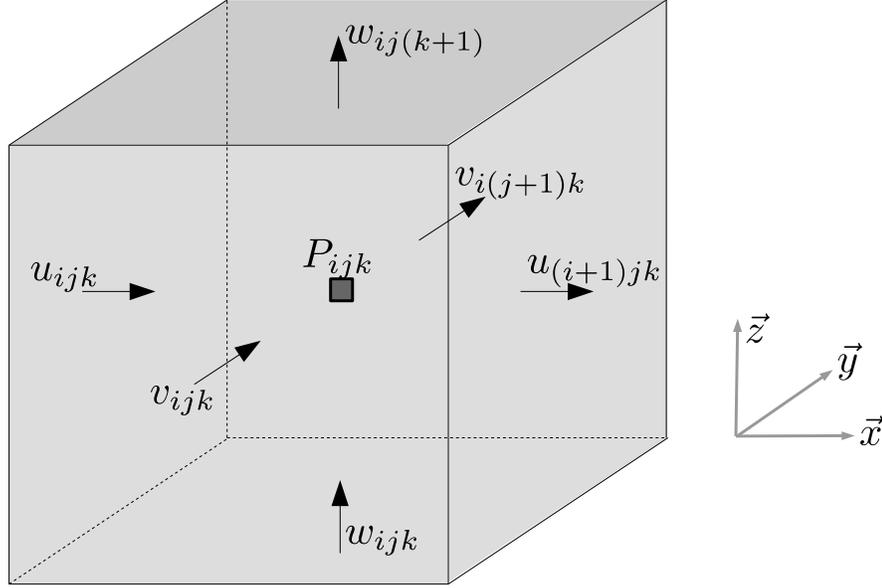


Figura C.2: Disposición utilizada para las variables en el volumen de control ijk . Expuestos en la figura están las componentes del vector velocidad $\mathbf{u} = (u, v, w)$ y el campo de presión p .

ponde al uso de los sólidos platónicos, lo cual resulta inadecuado dado que la figura de mayor cantidad de aristas es el icosaedro que permite la generación de 30 puntos. Dentro de las estimaciones realizadas en su publicación de 2005, Uhlmann estimó que para una partícula esférica de radio r_c , el número N_l de marcadores lagrangianos requeridos para cubrir apropiadamente una esfera son aproximadamente

$$N_l \approx \frac{\pi}{3} \left(12 \frac{r_c^2}{h^2} + 1 \right) \quad (\text{C.1})$$

En la literatura, para simulaciones de partículas sólidas esféricas es normal el uso de aproximadamente 16 «nodos por diámetro de la partícula», es decir, $r_c \approx 6h$. Reemplazando en la ecuación (C.1) se obtiene $N_l \approx 805$, algo muy por sobre el límite exacto para la distribución de nodos.

Las alternativas disponibles en la literatura son múltiples, desde simulaciones que utilizan fuerzas repulsivas para repeler las partículas unas de

otras hasta alcanzar un punto de equilibrio hasta problemas de optimización de áreas. Detalles al respecto de este tópico pueden ser hallados en Popko (2012). En el presente trabajo se utilizaron dos metodologías.

La primera, sigue el mismo camino utilizado por Kempe and Fröhlich (2012a) quienes utilizan el método de Leopardi (2006) que presenta un algoritmo programado en Matlab para la distribución de puntos en esferas en regiones de igual área y pequeño diámetro. La segunda consiste el uso de una «*malla de Fibonacci*» que permite una rápida distribución de un número impar de puntos mediante un algoritmo contenido en el código fuente del programa aquí expuesto. Dentro de las simulaciones realizadas, las mallas de Fibonacci presentaron resultados similares a las generadas mediante el método de Leopardi y se han demostrado útiles para el desarrollo de ensayos rápidos y estables, siendo su validación rigurosa un tema pendiente.

C.3. Discretización de las ecuaciones

Las ecuaciones se discretizarán de manera similar al capítulo referente al caso bidimensional. Notar que los operadores referidos en esta sección—aparecerán en su versión tridimensional. Se advierte al lector que se prescindirá de mayores explicaciones interpretando el sentido de las ecuaciones pues ello ya fue expuesto en el capítulo anterior, el presente se remite solamente a quehaceres de carácter numérico.

Todas las ecuaciones vectoriales serán resueltas para aquella variable que esté en la dirección x ; la discretización para las otras direcciones es recíproca y simplemente se deberán cambiar las variables e índices respectivos.

C.3.1. Estimación del campo de fluido preliminar: «step a»

La ecuación denominada (4.4) será reescrita en función de los operadores \mathbb{L} , \mathbb{G} y \mathbb{C} , que corresponden al operador para el laplaciano, gradiente y término convectivo, respectivamente, de modo que la ecuación anterior puede ser reescrita como:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^{q-1} + \Delta t (2\alpha_q \nu \mathbb{L}(\mathbf{u}^{q-1}) - 2\alpha_q \mathbb{G}(p^{q-1}) - \gamma_q \mathbb{C}(\mathbf{u}^{q-1}) - \zeta_q \mathbb{C}(\mathbf{u}^{q-2})). \quad (\text{C.4})$$

El término laplaciano \mathbb{L} será discretizado mediante diferencias finitas utilizando el *stencil* de siete puntos:

Apartado 1: Detalles sobre la implementación de la distribución de puntos mediante el método de Fibonacci.

Distribución de puntos de Fibonacci

Es de sencilla construcción y permite distribuir una cantidad impar de puntos sobre la superficie de una esfera, de manera regular y donde éstos cubren áreas similares de su superficie. Para más detalles sobre el método revisar la publicación de González (2009).

Sea N un número entero, tal que $N_L = 2N + 1$. En coordenadas esféricas se describirá al punto i -ésimo en función de su latitud lat_i y su longitud lon_i , estando estos parámetros a partir de la regla:

DO $i = -N, N$

$$\text{lat}_i = \arcsin\left(\frac{2i}{2N+1}\right), \quad (\text{C.2})$$

$$\text{lon}_i = \text{mod}(j, \phi)2\pi/\phi \quad (\text{C.3})$$

$$\text{IF}(\text{lon}_i < -\pi) \quad \text{lon}_i = \text{lon}_i + 2\pi$$

$$\text{IF}(\text{lon}_i > +\pi) \quad \text{lon}_i = \text{lon}_i - 2\pi$$

END DO

Donde $\phi = (1 + \sqrt{5})/2$ es la constante de Fibonacci o «*número áureo*» y «mod» es la operación módulo.

$$\mathbb{L}(u) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (\text{C.5})$$

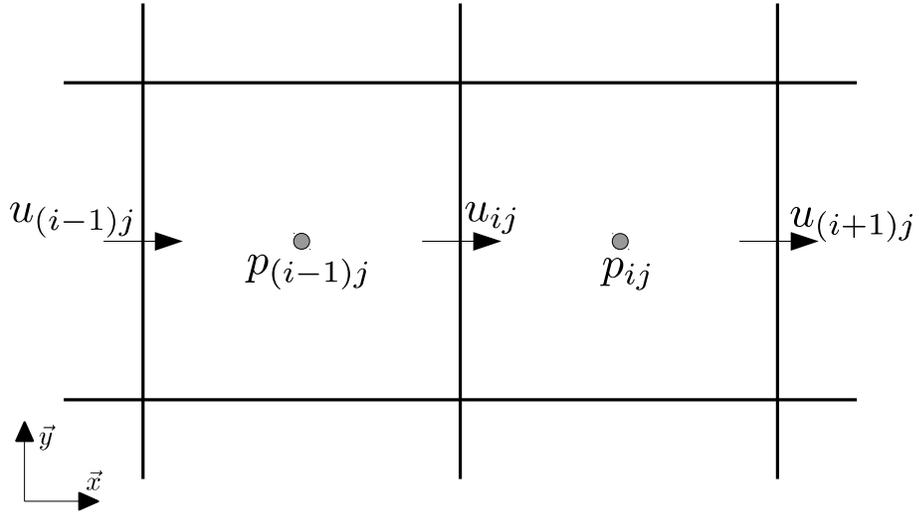
$$\begin{aligned} \mathbb{L}(u) \approx & \left(\frac{1}{h^2}\right) (u_{(i-1)jk} + u_{i(j-1)k} + u_{ij(k-1)} \\ & - 6u_{ijk} + u_{(i+1)jk} + u_{i(j+1)k} + u_{ij(k+1)}), \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

donde se ha omitido el superíndice $q - 1$ para simplificar la notación.

El gradiente \mathbb{G} se discretiza según la componente de $\tilde{\mathbf{u}}$ que se esté calculando, variando únicamente la dirección de la derivada. El proceder en este caso, no difiere del caso bidimensional, y por tanto la discretización utilizada para la dirección x es la siguiente:

$$\mathbb{G}_u(p) = \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{p_{ijk} - p_{(i-1)jk}}{h} \quad (\text{C.7})$$

Figura C.3: Esquema para la discretización de $\partial p/\partial x$. Subíndices j y k omitidos al no sufrir cambios.



El término convectivo \mathbb{C} en su forma conservativa para la componente u se expresa como:

$$\mathbb{C}(u) = \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} + \frac{\partial(uw)}{\partial z} \quad (\text{C.8})$$

El primer término, que coincide con la dirección principal es discretizado mediante:

$$\frac{\partial(uu)}{\partial x} \approx \frac{(uu)_{i+1} - (uu)_i}{h} \quad (\text{C.9})$$

$$(uu)_i - (uu)_{i-1} \approx \left(\frac{u_{(i+1)} + u_i}{2} \right)^2 - \left(\frac{u_{(i-1)} + u_i}{2} \right)^2 \quad (\text{C.10})$$

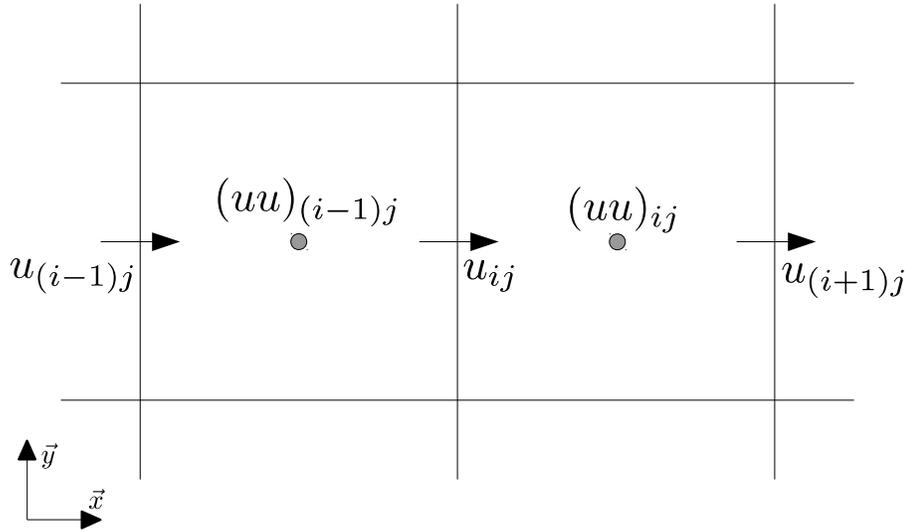


Figura C.4: Esquema para la discretización del término convectivo en una *dirección primaria*. Los subíndices j y k han sido omitidos del diagrama por mantenerse constantes para cada nodo indicado.

donde se ha prescindido de los subíndices j y k para no complejizar innecesariamente la ecuación (C.10) puesto que no varían. El esquema (C.4) permite observar la disposición de los nodos utilizados.

A partir del resultado anterior se obtiene la aproximación del término en discusión, escrito en extenso:

$$\frac{\partial(uu)}{\partial x} \approx \frac{u_{(i+1)jk}^2 + 2u_{(i+1)jk}u_{ijk} - 2u_{ijk}u_{(i-1)jk} - u_{(i-1)jk}^2}{4h}. \quad (\text{C.11})$$

Por otra parte, los dos términos restantes de la ecuación (C.8) corresponden a cálculos están asociados a *direcciones secundarias* y los procedimientos para su aproximación son recíprocos. Por lo mismo, sólo se expondrá la discretización del segundo término:

$$\frac{\partial(uv)}{\partial y} \approx \frac{(uv)_{j+1} - (uv)_j}{h}, \quad (\text{C.12})$$

donde la nomenclatura utilizada puede ser comprendida observando la figura

(C.5). Dado que los términos de forma (uv) no están disponibles directamente, se interpolará a partir de los nodos contiguos un valor aproximado, así:

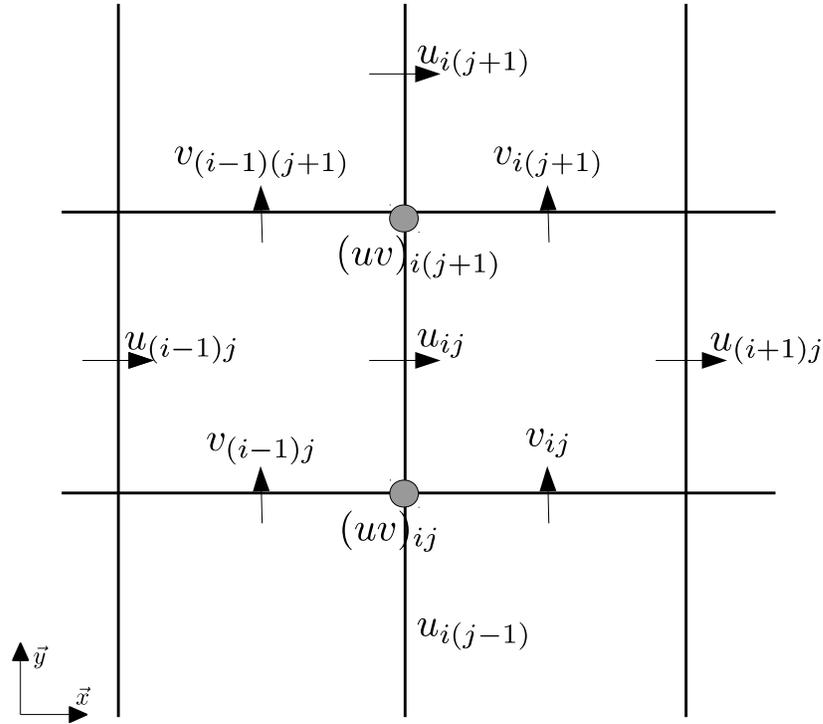


Figura C.5: Esquema para la discretización del término convectivo en una *dirección secundaria*. El subíndice k ha sido omitido del diagrama por mantenerse constante para cada nodo indicado.

$$(uv)_j \approx \left(\frac{u_{ij} + u_{i(j-1)}}{2} \right) \left(\frac{v_{(i-1)j} + v_{ij}}{2} \right) \quad (\text{C.13})$$

Reemplazando y reuniendo los términos semejantes se obtiene la siguiente aproximación para la ecuación (C.12):

$$\frac{\partial(uv)}{\partial y} \approx \left(\frac{1}{4h} \right) \left((u_{ijk} + u_{i(j+1)k})(v_{(i-1)(j+1)k} + v_{i(j+1)k}) - (u_{ijk} + u_{i(j-1)k})(v_{(i-1)jk} + v_{ijk}) \right) \quad (\text{C.14})$$

que incluye el subíndice k omitido anteriormente. Mediante un planteamiento análogo, se obtiene para el último miembro del término convectivo

$$\frac{\partial(uw)}{\partial z} \approx \left(\frac{1}{4h} \right) \left((u_{ijk} + u_{ij(k+1)})(w_{(i-1)j(k+1)} + w_{ij(k+1)}) - (u_{ijk} + u_{ij(k-1)})(w_{(i-1)jk} + w_{ijk}) \right) \quad (\text{C.15})$$

Reemplazando las ecuaciones (C.11), (C.14) y (C.15) y sobre (C.8) se obtiene la expresión completa para la aproximación del término convectivo que no será expuesta acá dado el largo de dicha ecuación.

C.3.2. Determinación del campo de forzado euleriano: «step b» al «step d»

Para el traspaso de información se utilizará la versión tridimensional de la función delta de Roma consistente en:

$$\delta^{(3d)}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_l) = \delta(x - X_l)\delta(y - Y_l)\delta(z - Z_l), \quad (\text{C.16a})$$

donde:

$$\delta(x - X_l) = \frac{1}{h}\psi\left(\frac{x - X_l}{h}\right), \quad (\text{C.16b})$$

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{1}{3}(1 + \sqrt{-3r^2 + 1}), & |r| \leq 0.5 \\ \frac{1}{6}(5 - 3|r| - \sqrt{-3(1 - |r|^2 + 1)}), & 0.5 \leq |r| \leq 1.5 \\ 0, & |r| > 1.5. \end{cases} \quad (\text{C.16c})$$

Notando que es semejante a su símil bidimensional, con un término adicional conforme a la dirección nueva que se está considerando. Estas ecuaciones serán utilizadas para el traspaso de información en los pasos «step b», «step c» y «step d». Teniendo esto en mente, estas ecuaciones en su versión tridimensional serán:

$$\tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{X}_l) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \tilde{\mathbf{u}}_{ij} \delta^{(3d)}(\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{X}_l) h^3, \quad 1 \leq l \leq N_L, \quad (\text{C.17})$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}_l) = \frac{\mathbf{U}^{(d)}(\mathbf{X}_l) - \tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{X}_l)}{\Delta t}, \quad \forall l. \quad (\text{C.18})$$

$$\mathbf{f}_{ij} = \sum_{l=1}^{N_L} \mathbf{F}(\mathbf{X}_l) \delta^{(3d)}(\mathbf{x}_{ij} - \mathbf{X}_l) \Delta V_L, \quad (\text{C.19})$$

donde $\Delta V_L = h^3$.

C.3.3. Imposición de la condición de no-deslizamiento: «step e»

La resolución de la ecuación (4.8) exige uso de una librería apropiada y –al igual que en el caso bidimensional– se ha optado por el uso de *Intel MKL 11.3*. Para adecuar la función al *solver* se invierte el signo en ambos lados de la igualdad, resultando:

$$-\nabla^2 \mathbf{u}^* + Q \mathbf{u}^* = \frac{1}{\nu \alpha_q} \left(\frac{\tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} + \mathbf{f}^q \right) - \nabla^2 \mathbf{u}^{q-1}, \quad (\text{C.20})$$

donde $Q \geq 0$ y:

$$Q = \frac{1}{\alpha_q \nu \Delta t}. \quad (\text{C.21})$$

Se define al vector $\mathbf{d} = (d_x, d_y, d_z)$ que contiene a los términos a la derecha del signo de igualdad, de este modo:

$$\mathbf{d}(x, y, z) = \frac{1}{\nu \alpha_q} \left(\frac{\tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} + \mathbf{f}^q \right) - \nabla^2 \mathbf{u}^{q-1}. \quad (\text{C.22})$$

donde $\mathbf{d} = (d_x, d_y, d_z)$ y $Q = 1/\alpha_q \nu \Delta t$. El término laplaciano de (C.22) es discretizado de forma idéntica a (C.6). De este modo, la expresión discretizada de la componente d_x es expresada como:

$$d_{x,ijk} = \frac{1}{\nu \alpha_q} \left(\frac{\tilde{u}_{ijk}}{\Delta t} + f_{x,ijk}^q \right) - \frac{1}{h^2} (u_{(i-1)jk} + u_{i(j-1)k} + u_{ij(k-1)} - 6u_{ijk} + u_{(i+1)jk} + u_{i(j+1)k} + u_{ij(k+1)}). \quad (\text{C.23})$$

Tanto el *solver* de *Intel* como otros evaluados (FISHPACK y MUDPACK) requieren el uso de variables centradas en la malla (como la presión) o en los vértices del volumen de control (esquema de discretización *centrado*). Como las componentes de la velocidad en las mallas desplazadas no se adecuan a ninguno de los dos casos permitidos, se procede a realizar interpolaciones hacia una malla centrada. Existe una única excepción a lo anterior, que es cuando el problema posee condiciones de contorno periódicas en todas las direcciones pues es posible manipular los arreglos para hacer una malla centrada equivalente sin necesidad de interpolar.

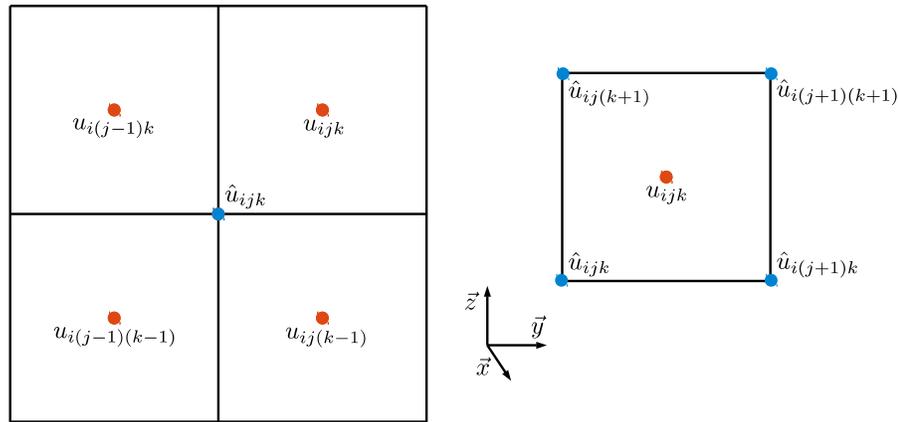


Figura C.6: Disposición de puntos para la interpolación de la velocidad entre mallas centradas y desplazadas.

C.3.4. Pasos de corrección por presión: «step f» al «step h»

En el caso de la ecuación de Poisson (4.9), para su resolución se acude a la misma metodología, con la salvedad que en este caso $Q = 0$. De este modo:

$$d_\phi(x, y, z) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{2\alpha_q \Delta t} \quad (\text{C.24})$$

$$d_{\phi,ijk} = \frac{u_{(i+1)jk} - u_{ijk} + v_{i(j+1)k} - v_{ijk} + w_{ij(k+1)} - w_{ijk}}{2\alpha_q \Delta t h} \quad (\text{C.25})$$

Las ecuaciones (4.10) y (4.11) corresponden a los pasos estándares de corrección por presión. Su resolución es directa y la versión discretizada de ambas ecuaciones se presenta a continuación:

$$u_{ijk}^q = u_{ijk}^* - \frac{2\alpha_q \Delta t}{h^2} (\phi_{(i+1)jk} - \phi_{ijk}) \quad (\text{C.26})$$

$$p_{ijk}^q = p_{ijk}^{q-1} + \phi_{ijk} - \frac{\alpha_q \Delta t \nu}{h^2} (\phi_{(i-1)jk} + \phi_{i(j-1)k} + \phi_{ij(k-1)} - 6\phi_{ijk} + \phi_{(i+1)jk} + \phi_{i(j+1)k} + \phi_{ij(k+1)}) . \quad (\text{C.27})$$

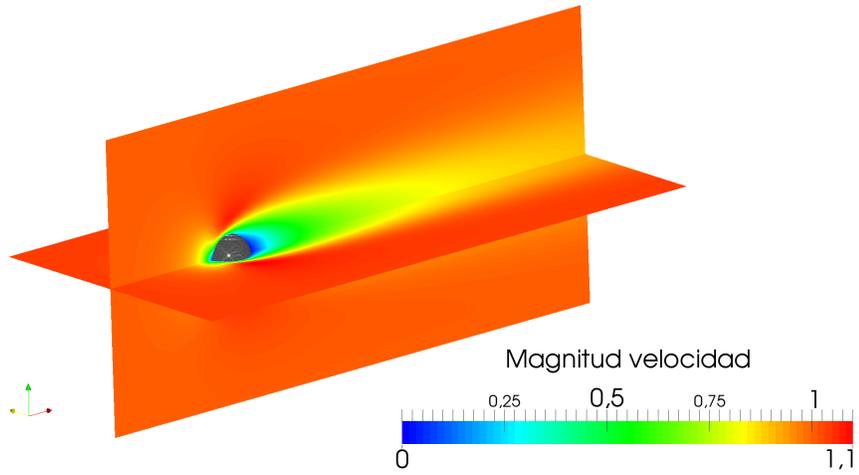
C.3.5. Resultados de muestra

Se presentan a continuación resultados referenciales para una esfera estacionaria de diámetro D sumergida en un dominio de dimensiones $\Omega = [0, 16D] \times [0, 8D] \times [0, 8D]$ a un Reynolds $Re_P = U_\infty D / \nu_f = 500$. Se establece que $D = 1$, $nu_f = 0.1$ y $U_\infty = 50$. Adicionalmente se utiliza un $\Delta t = 0.0003$.

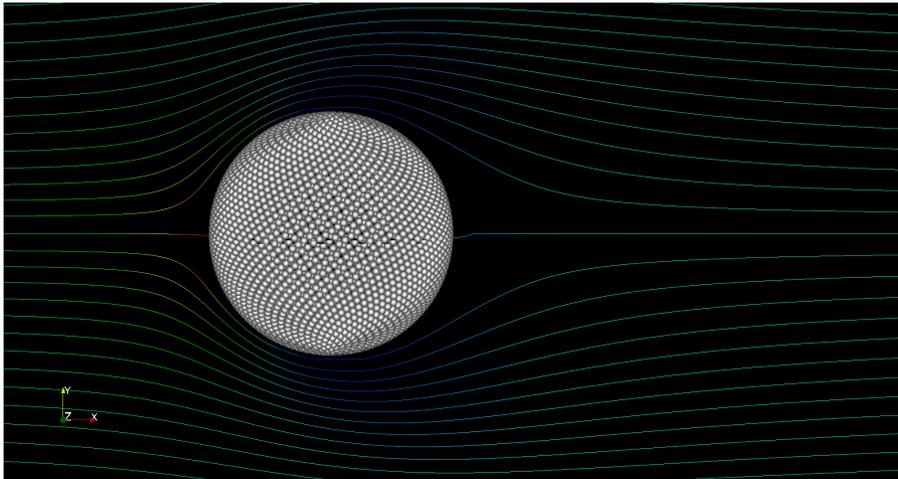
A lo largo de esta simulación y de otras, variando el número de Reynolds entre 150 y 500, no se pudieron apreciar inestabilidades ni un desarrollo correcto de una estela detrás de la esfera, razón por la cual se consideran a estas simulaciones como fallidas. Destaca al menos una estabilidad del flujo dentro del dominio y una visible aplicación de la condición de contorno alrededor de la esfera.

Se presentan acá solamente para dar testimonio de un trabajo que quedará como maqueta para alguna línea de investigación futura que pretenda implementar el método derivado de Uhlmann (2005) en tres dimensiones.

Nótese que la magnitud del campo de velocidades es prácticamente idéntica a su componente u , razón por la cual se optó por no añadirla. A su vez, la componente w del campo de velocidades es prácticamente nula en el plano XY y en el plano XZ es idéntica a su símil v aquí mostrada.

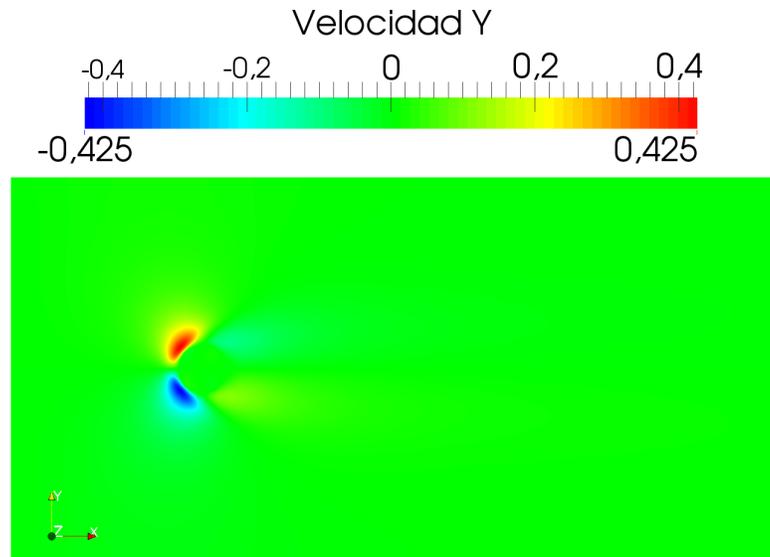


(a) Magnitud del campo de velocidades en el plano XY.

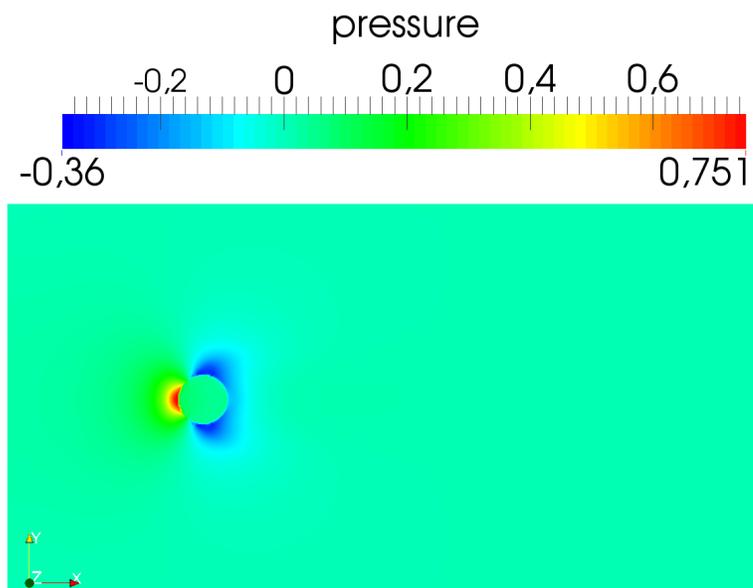


(b) Líneas de corriente alrededor de la esfera en el plano XY. La imagen también permite observar la distribución de puntos mediante el método de Fibonacci.

Figura C.7: Capturas de pantalla para una simulación tridimensional. Imágenes en corte corresponden al plano XY de la simulación, destacando que el fluido sigue al eje x . Velocidades adimensionalizadas con la velocidad $U_\infty = 50$.



(c) Campo de velocidades v en un plano XY centrado en el dominio. Velocidad adimensionalizada utilizando la velocidad de entrada U_∞ .



(d) Campo de presión v en un plano XY centrado en el dominio. Presión adimensionalizada utilizando el cuadrado de la velocidad de entrada U_∞^2 .

Bibliografía

- B. Andreotti, Y. Forterre, y O. Pouliquen. *Granular Media. Between Fluid and Solid*. 2013.
- G. K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press, 1967.
- H. Brenner. The slow motion of a sphere through a viscous fluid towards a plane surface. *Chemical Engineering Science*, 16(3-4):242–251, 1961.
- W.-P. Breugem. A second-order accurate immersed boundary method for fully resolved simulations of particle-laden flows. *Journal of Computational Physics*, 231(13):4469–4498, 2012.
- D. L. Brown, R. Cortez, y M. L. Minion. Accurate Projection Methods for the Incompressible Navier–Stokes Equations. *Journal of Computational Physics*, 168(2):464–499, 2001.
- C. S. Campbell y C. E. Brennen. Computer simulation of granular shear flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 151:167–188, 1985.
- S. Chen y G. D. Doolen. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1):329–364, 1998.
- P. Costa, B. J. Boersma, J. Westerweel, y W. P. Breugem. Collision model for fully resolved simulations of flows laden with finite-size particles. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 92(5), 2015.
- C. Crowe, J. Schwarzkopf, M. Sommerfeld, y Y. Tsuji. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press, 2012.
- P. A. Cundall y O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29:47–65, 1979.

- R. H. Davis, J.-M. Serayssol, y E. J. Hinch. the Elastohydrodynamic Collision of 2 Spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 163:479–497, 1986.
- N. G. Deen, M. Van Sint Annaland, M. a. Van der Hoef, y J. a. M. Kuipers. Review of discrete particle modeling of fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 62(1-2):28–44, 2007.
- A. Di Renzo y F. P. Di Maio. Comparison of contact-force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes. *Chemical Engineering Science*, 2004.
- S. Elghobashi. On predicting particle-laden turbulent flows. *Applied Scientific Research*, 52(4):309–329, June 1994.
- A. Engdahl. *Desarrollo de un código computacional de simulación a grandes escalas de flujos turbulentos en un canal plano*. PhD thesis, 2015.
- E. Fadlun, R. Verzicco, P. Orlandi, y J. Mohd-Yusof. Combined Immersed-Boundary Finite-Difference Methods for Three-Dimensional Complex Flow Simulations. *Journal of Computational Physics*, 161(1):35–60, 2000.
- Z.-G. Feng y E. E. Michaelides. The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid–particles interaction problems. *Journal of Computational Physics*, 195(2):602–628, 2004. ISSN 0021-9991. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2003.10.013>.
- R. Glowinski, T. W. Pan, T. I. Hesla, y D. D. Joseph. A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 25(5):755–794, 1999.
- R. Glowinski, T. W. Pan, T. I. Hesla, D. D. Joseph, y J. Périaux. A Fictitious Domain Approach to the Direct Numerical Simulation of Incompressible Viscous Flow past Moving Rigid Bodies: Application to Particulate Flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2):363–426, 2001.
- P. Gondret, M. Lance, y L. Petit. Bouncing motion of spherical particles in fluids. *Physics of Fluids*, 14(2):643–652, 2002.
- Á. González. Measurement of Areas on a Sphere Using Fibonacci and Latitude–Longitude Lattices. *Mathematical Geosciences*, 42(1):49, 2009.
- S. Haeri y J. S. Shrimpton. On the application of immersed boundary, fictitious domain and body-conformal mesh methods to many particle multiphase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 40:38–55, 2012.

- E. Helland, R. Occelli, y L. Tadríst. Numerical study of cohesive in a dense fluidized bed. *Mécanique des fluides numérique*, 327:1397–1403, 1999.
- B. P. B. Hoomans, J. A. M. Kuipers, W. J. Briels, y W. P. M. Van Swaaij. Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: a hard-sphere approach. *Chemical Engineering Science*, 51(1):99–118, 1996.
- H. Hu, N. Patankar, y M. Zhu. Direct numerical simulations of fluid-solid systems using the arbitrary lagrangian-eulerian technique. *Journal of Computational Physics*, 169(2):427–462, 5 2001.
- G. G. Joseph, R. Zenit, M. L. Hunt, y A. M. Rosenwinkel. Particle-wall collisions in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 433:329–346, 2001.
- T. Kempe y J. Fröhlich. Collision modelling for the interface-resolved simulation of spherical particles in viscous fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 709:445–489, 2012a.
- T. Kempe y J. Fröhlich. An improved immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particle laden flows. *Journal of Computational Physics*, 231(9):3663–3684, 2012b.
- A. J. C. Ladd y R. Verberg. Lattice-Boltzmann Simulations of Particle-Fluid Suspensions. *Journal of Statistical Physics*, 104(5):1191–1251, sep 2001.
- P.-Y. Lagrée. Small Re flows , $\epsilon = \text{Re}$. pages 1–18, 2015.
- H. Lamb. On the uniform motion of a sphere through a viscous fluid. *Katalog BPS*, XXXIII(2):81–87, 1911.
- D. Legendre, R. Zenit, C. Daniel, y P. Guiraud. A note on the modelling of the bouncing of spherical drops or solid spheres on a wall in viscous fluid. *Chemical Engineering Science*, 61(11):3543–3549, 2006.
- P. Leopardi. A partition of the unit sphere $S^c R$ into regions of equal measure and small diameter. *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 25(309-327), 2006.
- C. Liu, X. Zheng, y C. Sung. Preconditioned Multigrid Methods for Unsteady Incompressible Flows. *Journal of Computational Physics*, 139(1): 35–57, 1998.

- X. Lu y C. Dalton. Calculation of the timing of vortex formation from an oscillating cylinder. *Journal of Fluids and Structures*, pages 527–541, 1996.
- K. Luo, Z. Wang, J. Fan, y K. Cen. Full-scale solutions to particle-laden flows: Multidirect forcing and immersed boundary method. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 76(6):1–9, 2007.
- N. Maw, J. Barber, y J. Fawcett. The oblique impact of elastic spheres. *Wear*, 38(1):101–114, 1976.
- N. Maw, J. Barber, y J. Fawcett. The rebound of elastic bodies in oblique impact. *Mechanics Research Communications*, 4(1):17–22, 1977.
- E. E. Michaelides. Hydrodynamic Force and Heat/Mass Transfer From Particles, Bubbles, and Drops—The Freeman Scholar Lecture. *Journal of Fluids Engineering*, 125(2):209, 2003.
- R. Mindlin y H. Deresiewicz. Elastic spheres in contact under varying oblique forces. *Transactions of ASME, Series E, Journal of Applied Mechanics*, 1953.
- R. Mittal y G. Iaccarino. Immersed Boundary Methods. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 37(1):239–261, 2005.
- J. Park, K. Kwon, y H. Choi. Numerical solutions of flow past a circular cylinder at Reynolds numbers up to 160. *KSME International Journal*, 12(6):1200–1205, 1998.
- C. S. Peskin. Flow patterns around heart valves: A numerical method. *Journal of Computational Physics*, 10(2):252–271, 1972.
- F. Picano, W.-P. Breugem, y L. Brandt. Turbulent channel flow of dense suspensions of neutrally buoyant spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 764:463–487, 2015. ISSN 0022-1120.
- A. Pinelli, I. Z. Naqavi, U. Piomelli, y J. Favier. Immersed-boundary methods for general finite-difference and finite-volume Navier-Stokes solvers. *Journal of Computational Physics*, 229(24):9073–9091, 2010. ISSN 0021-9991.
- E. S. Popko. *Divided Spheres. Geodesics and the Orderly Subdivision of the Sphere*. CRC Press, 2012.

- A. Prosperetti. Life and death by boundary conditions. pages 1–4, 2015.
- A. Prosperetti y G. Tryggvason. *Computational Methods for Multiphase Flow*. Cambridge University Press, 2009. ISBN 9780521138611.
- I. Proudman y J. R. A. Pearson. Expansions at small Reynolds numbers for the flow past a sphere and a circular cylinder. *October*, (7):237–262, 1956.
- M. M. Rai y P. Moin. Direct simulations of turbulent flow using finite-difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 96(1):15–53, 1991.
- A. M. Roma, C. S. Peskin, y M. J. Berger. An adaptive version of the immersed boundary method. *Journal of Computational Physics*, 153(2): 509–534, 1999.
- N. Sharma y N. A. Patankar. A fast computation technique for the direct numerical simulation of rigid particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 205(2):439 – 457, 2005.
- M. Uhlmann. Simulation of Particulate Flows on Multi-Processor Machines with Distributed Memory. Technical Report May, 2003.
- M. Uhlmann. New Results on the Simulation of Particulate Flows. (March), 2004.
- M. Uhlmann. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 209 (2):448–476, 2005.
- M. Uhlmann. Interface-resolved direct numerical simulation of vertical particulate channel flow in the turbulent regime. *Physics of Fluids*, 20(5): 53305, 2008.
- K. Usman. *Numerical Analysis of Collision Models in 2D Particulate Flow*. PhD thesis, Technischen Universität Dortmund, 2013.
- B. G. M. van Wachem y A. E. Almstedt. Methods for multiphase computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Journal*, 96(1):81–98, 2003. ISSN 1385-8947.
- L. Vu-quoc y X. Zhang. An accurate and efficient tangential force-displacement model for elastic frictional contact in particle-flow simulations. *Mechanics of Materials*, 31:235–269, 1999.